

Министерство образования и науки Российской Федерации

УДК: 551.322, 536.421

ГРНТИ: 37.29, 30.17

Инв. №: П1071/3

УТВЕРЖДЕНО:

Исполнитель:

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Уральский
федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н.Ельцина»

От имени Руководителя организации

_____/_____
М.П.

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ОТЧЕТ

о выполнении 3 этапа Государственного контракта
№ П1071 от 24 августа 2009 г. и Дополнению от 23 октября 2009 г. № 1/П1071,
Дополнению от 27 февраля 2010 г. № 2/П1071, Дополнению от 27 июля 2010 г. № 3,
Дополнению от 14 марта 2011 г. № 4

Исполнитель: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет имени
первого Президента России Б.Н.Ельцина»

Программа (мероприятие): Федеральная целевая программа «Научные и научно-
педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг., в рамках реализации
мероприятия № 1.2.1 Проведение научных исследований научными группами под
руководством докторов наук.

Проект: Динамика фазовых переходов при замерзании льда и ее влияние на
теплообмен между океаном и атмосферой

Руководитель проекта:

_____/Александров Дмитрий Валерьевич
(подпись)

Екатеринбург
2011 г.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ИСПОЛНИТЕЛЕЙ
по Государственному контракту П1071 от 24 августа 2009 на выполнение поисковых
научно-исследовательских работ для государственных нужд

Организация-Исполнитель: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»

Руководитель темы:

доктор физико-математических наук, профессор	_____ Александров Д. В.
	подпись, дата

Исполнители темы:

кандидат физико-математических наук, доцент	_____ Малыгин А. П.
	подпись, дата

кандидат физико-математических наук, без ученого звания	_____ Низовцева И. Г.
	подпись, дата

кандидат физико-математических наук, без ученого звания	_____ Иванов А. А.
	подпись, дата

без ученой степени, без ученого звания	_____ Корольков Е. А.
	подпись, дата

без ученой степени, без ученого звания	_____ Изюрьева О. И.
	подпись, дата

без ученой степени, без ученого звания	_____ Рахматуллина И. В.
	подпись, дата

без ученой степени, без ученого звания	_____ Нетребя А. В.
	подпись, дата

Реферат

Отчет 163 с., 9 ч., 19 рис., 1 табл., 124 источн., 1 прил.

кристаллизация льдов, фазовые переходы, течения жидкости, турбулентность, двухфазная зона, неустойчивость, тепломассоперенос

В отчете представлены результаты исследований, выполненных по 3 этапу Государственного контракта № П1071 "Динамика фазовых переходов при замерзании льда и ее влияние на теплообмен между океаном и атмосферой" (шифр "НК-33П") от 24 августа 2009 по направлению "Геофизика" в рамках мероприятия 1.2.1 "Проведение научных исследований научными группами под руководством докторов наук.", мероприятия 1.2 "Проведение научных исследований научными группами под руководством докторов наук и кандидатов наук", направления 1 "Стимулирование закрепления молодежи в сфере науки, образования и высоких технологий." федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 годы.

Цель работы - аналитическое описание нестационарной нелинейной динамики кристаллизационных процессов при наличии двухфазной зоны на различных этапах затвердевания в зависимости от теплофизических параметров системы

методы теоретического моделирования тепломассообменных процессов и задач с движущимися границами фазовых переходов, методы исключения и малого параметра, методы приближенной формулировки и анализа рассматриваемой проблемы

1. Компьютеры уровня не ниже Intel Pentium IV. Лицензионное программное обеспечение ("Mathcad 14", "Maple 9", "Origin 7.5"). 2. Компьютеры, оснащенные математическими пакетами "Mathcad 14", "Maple 9", "Origin 7.5", позволяющие проводить обработку полученных результатов и проведение теоретических расчетов. 3. Теории тепломассопереноса, двухфазной зоны, устойчивости и авторские методы решения подобных задач, развитые в предшествующие годы (см., например, Д.В. Александров, А.П. Малыгин // Доклады АН, 2006, Т. 411, N 3, С. 390-394; D.V. Alexandrov // J. Crystal Growth, 2001, V. 222, P. 816-821; D.V. Alexandrov, D.L. Aseev // J. Fluid Mech., 2005, V. 527, P. 57-66; D.V. Alexandrov, I.G. Nizovtseva // Int. J. Heat Mass Trans., 2008, V. 51, P. 5204-5208; Д.В.

Александров // Доклады АН, 2008, Т. 422, N 3, С. 322-326). Компьютеры уровня не ниже Intel Pentium IV. Лицензионное программное обеспечение (“Mathcad 14”, “Maple 9”, “Origin 7.5”).

Были разработаны математическая модель и методы ее решения для дендритного роста льда (роста отдельно взятых выступов) при учете турбулизации жидкости на его поверхности. Данное исследование позволило изучить динамику роста изолированных дендритных структур, растущих в переохлажденной морской воде, с учетом течений жидкости вблизи межфазной границы лед – океан. Были разработаны модели и методы их решения для кристаллизации воды в трещинах льдов с учетом процессов образования и роста ложного дна. Данные исследования базировались на предыдущих работах коллектива авторов в данном направлении (Д.В. Александров, А.О. Иванов // Доклады АН, 2002, Т. 385, N 3, С. 323-327; D.V. Alexandrov, A.P. Malygin // Int. J. Heat Mass Trans., 2006, V. 49, P. 763-769; Д.В. Александров // ЖЭТФ, 2009, Т. 135, вып. 5, С. 942-950; Д.В. Александров, А.П. Малыгин // Доклады АН, 2006, Т. 411, N 3, С. 390-394; Д.В. Александров, И.Г. Низовцева, Доклады АН // 2008, Т. 419, N 2, С. 262-265). Были определены температурное поле, поле солёности, положение межфазной границы, исследована эволюция переохлаждения в жидкости, определены поправки к тепловому потоку, вызванные совместным замерзанием воды в трещинах льда (в направлении океана) и ростом ложного дна (в обратном направлении). Такое исследование позволило изучить динамику роста дендритных структур льда в метастабильной переохлажденной морской воде и определить влияние ложного дна на замерзание воды в трещинах льда.

Аннотация.

Проект направлен на решение фундаментальной проблемы теории фазовых превращений - исследование основных закономерностей структурно фазовых переходов в процессах тепло- и массопереноса, осложненных гидродинамическими и конвективными течениями жидкости, явлениями нуклеации и кинетики частиц, неустойчивостями поверхностей раздела фаз и другими нелинейными явлениями при замерзании океанических льдов. Предлагаемые в настоящем проекте исследования обладают несомненной новизной и значимостью для Российской Федерации, традиционно заинтересованной в изучении проблем севера (замерзание льдов и влияние этого процесса на тепловой бюджет планеты и климатические изменения).

В соответствии с конкурсной документацией проведены следующие виды работ по третьему этапу (выполнена следующая последовательность действий):

1. Проведены теоретические исследования III этапа: разработана математическая модель дендритного роста льда при учете турбулизации жидкости на его поверхности. Разработана математическая модель кристаллизации воды в трещинах льдов с учетом процессов образования и роста ложного дна. Построены теоретические решения разработанных моделей.
2. Подготовлены публикации результатов исследований для зарубежных журналов или рекомендованных ВАК по исследуемым проблемам.
3. Выполнены обобщение и оценка результатов исследований в сравнении с современным научно-техническим уровнем.
4. Разработаны рекомендации по использованию результатов НИР при создании научно-образовательных курсов. Выполнено методическое обеспечение образовательного процесса.
5. Разработаны рекомендации по возможности использования результатов проведенных НИР в реальных секторах экономики.

Проведены теоретические исследования III этапа: В работе рассмотрен рост изолированного дендрита в жидкую фазу системы при наличии в ней набегающего потока. Термодиффузионная модель процесса основана на стефановском приближении фронтальной границы между растущим кристаллом и окружающей его жидкостью и гидродинамических уравнениях Осеена. Из условия микроскопической разрешимости на основе линейного анализа устойчивости получен критерий устойчивого роста двумерного параболического дендрита с учетом анизотропии поверхностного натяжения на межфазной границе кристалл-расплав. Найденный критерий содержит ранее полученные критерии для роста изолированного дендрита в однокомпонентной среде с конвекцией жидкости и роста изолированного дендрита в неподвижной бинарной системе. Показано, что развиваемая теория справедлива при произвольных числах Рейнольдса и Пекле, определяемых скоростью набегающего на дендрит потока жидкости. Сделано обобщение теории на случай трехмерного дендритного роста. Теория дендритного роста адаптирована для кристаллизации в двухфазной зоне трехкомпонентных систем. В основной области фазовый переход претерпевает основной компонент, а в котектической – два компонента. Разработан метод построения точных аналитических решений задачи в основной и котектической двухфазных зонах. Метод сводится к переходу в уравнениях и граничных условиях модели к новой независимой переменной – доле жидкой фазы. На основе разработанного метода получены точные аналитические решения нелинейной системы уравнений с пограничными условиями на неизвестных границах фазовых переходов. Найдены распределения температуры и

концентраций примеси, доли твердой и жидкой фаз, скорость затвердевания и протяженности котектической и основной двухфазных зон. Показано, что концентрация примеси основного компонента убывает во всей области фазового превращения, а концентрация примеси второго примесного компонента имеет максимум в основной двухфазной области. Теория дендритного роста в области фазового перехода обобщена на случай турбулизации жидкости в океане. В работе развита математическая модель процесса кристаллизации при наличии анизотропной и неоднородной области фазового превращения с учетом конвективного тепло-массопереноса. Изложен механизм нарушения устойчивости процесса, заключающийся в конвективном переносе тепла и примеси по заполненным жидкостью каналам области фазового перехода. Проведен линейный анализ устойчивости с учетом течения среды в жидкой фазе системы, диффузии примеси в двухфазной зоне и зависимости коэффициентов переноса от фазового состава среды. Найден параметр эволюции возмущений для изотропной, однородной и анизотропной, неоднородной сред; получены кривые нейтральной устойчивости процесса. Показано, что учет диффузии примеси и увеличение неоднородности зоны фазового перехода расширяют область неустойчивости, а уменьшение анизотропии приводит к ее сужению. Получен новый критерий конвективной (морфологической) неустойчивости процесса кристаллизации с двухфазной зоной, который существенно увеличивает область неустойчивости при возрастании скорости конвективного течения расплава. Разработана теория кристаллизации льда в трещинах от холодной границы с атмосферой, в которой учтены процессы роста второго слоя льда (ложного дна) снизу от океана к атмосфере вследствие проникновения талой воды в подледовое пространство в весенне-летний период времени. Показано что процессы кристаллизации сверху и снизу являются независимыми друг от друга вследствие того, что две зоны фазового перехода разделены между собой слоем пресной воды нулевой температуры. Определены распределения температуры, солености морской воды, доли твердой фазы в обоих двухфазных регионах. Найдены законы нестационарной миграции границ фазовых переходов и скорости их движения.

Научные материалы, изложенные в отчете представляют собой единую теорию исследования нелинейных процессов направленной кристаллизации, протекающих при наличии зоны двухфазного состояния вещества в нестационарных условиях.

Результаты выполнения НИР использованы и будут использованы:

1. Для получения новых выводов и дальнейшего развития знаний о динамике фазовых

переходов при замерзании льда.

2. Для обновления лекционных курсов, читаемых студентам, таких как «Аналитические методы механики сплошных сред», «Тепломассоперенос», «Физика», написания пособий и учебно-научных монографий.

3. Для повышения квалификации молодых кадров в области геофизики, защиты кандидатских диссертаций членами группы, выполнения квалификационных работ членами группы - студентами.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	9
Основная часть	11
Аннотированная справка по научным результатам НИР	11
Аналитический отчет о проведении теоретических исследований	20
1. Математическая модель дендритного роста льда при учете турбулизации жидкости на его поверхности. Теоретическое решение разработанной модели	20
2. Математическая модель кристаллизации воды в трещинах льдов с учетом процессов образования и роста ложного дна. Теоретическое решение разработанной модели	64
Отчет по обобщению и оценке результатов исследований	87
Публикации результатов НИР	89
Заключение	144
Список используемых источников	150
Приложение	160

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность проблем исследований.

Поверхность полярных океанов претерпевает ежегодный цикл, в течение которого разница между минимальным и максимальным покрытием льда приблизительно составляет 8000000 кв. км. в Арктике и 18000000 кв. км. в Антарктике. В Арктическую зиму половина поверхностного теплового потока, отводимого в атмосферу, вызвана скрытой теплотой кристаллизации, которая составляет одну шестую часть испускаемого в атмосферу тепла (J.P. Peixoto and A.H. Oort, *Physics of Climate*, 1992, American Institute of Physics). Другими словами, замерзание льдов вносит очень важный вклад в энергетический бюджет атмосферы. Деформации молодых льдов регулярно вызывают трещины, известные в литературе как "leads", которые составляют от нескольких метров до нескольких километров в ширину. Это приводит к тому, что в Арктическую зиму относительно теплая вода (-2 градуса по Цельсию) в этих образованиях, находящаяся в тепловом контакте с холодной атмосферой (от -30 до -60 градусов по Цельсию) над ней, быстро покрывается тонким слоем льда. В течение суток лед в этих трещинах вырастает до десяти сантиметров, что является слабо сравнимым с окружающим эти образования льдом, типично имеющим толщину нескольких метров. Современные наблюдения показывают, что тепло, излучаемое через эти трещины в атмосферу, примерно составляет 300 Вт/кв.м. или в 15 раз больше, чем с поверхности окружающего льда (J. Morison et.al. *The Leadex Experiment*, 1993, *Eos. Trans. AGU*, Vol. 74, P. 393-397). Поэтому, хотя такие образования по площади поверхности занимают менее 10 процентов области поверхности, они ответственны за потерю, грубо говоря, половины океанического теплового потока.

Исследования данной проблематики берут начало с конца 19 века с работ Джозефа Стефана. В физике хорошо известен закон, открытый Стефаном в 1879 году и впоследствии выведенный Людвигом Больцманом из статистической термодинамики. Этот закон, закон излучения черного тела Стефана Больцмана, имеет большое значение в полярных исследованиях позволяя определить поверхностную температуру льда. Различные полярные экспедиции конца 19 века поставили вопрос об адекватном математическом описании явлений кристаллизации льда. Первая математическая модель такого процесса была предложена Стефаном и традиционно называется моделью Стефана с плоским фронтом. Впоследствии, подход Стефана стал применяться для моделирования процессов затвердевания расплавов. Это объясняется схожестью физической картины затвердевания

расплава и замерзания морской воды.

Математическое описание процессов кристаллизации основывается на уравнениях тепло- и массопереноса, записываемых во всех существующих фазах, и граничных условиях, имеющих смысл непрерывности, скачка или баланса температурного и концентрационного полей. Решение проблем подобного типа осложняется присутствием одной или более подвижных границ, перемещающихся, вообще говоря, с заранее неизвестной скоростью. Кроме того, задачи указанного типа, как правило, содержат нелинейности в граничных условиях, а зачастую, и в самих уравнениях переноса. Поэтому универсальных методов решения таких проблем не существует и в каждом конкретном случае следует подбирать определенный подход к решению. Следует особо подчеркнуть, что численное решение, основывающееся на фиксации большинства параметров системы, не во всех ситуациях может выполнять прогнозирующую роль и, как следствие, возникает необходимость получения приближенных аналитических решений, показывающих и выявляющих доминантную роль тех или иных характеристик системы. Вместе с тем, до настоящего времени были известны подходы получения аналитического решения либо стационарных задач, либо фронтальных автомодельных задач с движущимися границами. Однако, эти приближения работают далеко не всегда и являются непригодными для описания большинства нестационарных проблем особенно на начальных и конечных этапах процессов. В настоящей работе, на основе данных наблюдений и натурного эксперимента, излагаются оригинальные подходы аналитического описания нестационарных нелинейных проблем кристаллизации растворов и расплавов при наличии зоны двухфазного состояния вещества.

Цели и задачи работы. Аналитическое описание нестационарной нелинейной динамики кристаллизационных процессов при наличии двухфазной зоны на различных этапах затвердевания в зависимости от теплофизических параметров системы.

Ожидаемые научные результаты работы на третьем этапе состоят в:

- 1) разработке математической модели дендритного роста льда при учете турбулизации жидкости на его поверхности;
- 2) разработке математической модели кристаллизации воды в трещинах льдов с учетом процессов образования и роста ложного дна;
- 3) теоретическом решении разработанных моделей;
- 4) подготовке публикаций результатов исследований для зарубежных журналов или журналов, рекомендованных ВАК.

Основная часть

Аннотированная справка по научным результатам НИР

Результатом работ по проекту «Динамика фазовых переходов при замерзании льда и ее влияние на теплообмен между океаном и атмосферой» явилось проведение масштабных исследований по трем этапам государственного контракта № П1071 от 24 августа 2009 г. (с учетом Дополнения от 23 октября 2009 г. № 1/П1071, Дополнения от 27 февраля 2010 г. № 2/П1071 и Дополнения от 14 марта 2011 г. № 4) в соответствии с календарным планом.

На первом этапе были выполнены следующие работы по проекту:

Обзор научных информационных источников по тематике проблемы за период 1998 – 2008 гг.;

Написание аналитического обзора по исследуемой проблеме с оценкой вариантов возможных решений проблемы;

Выбор и обоснование оптимального варианта направления исследований, разработка плана проведения исследований;

Теоретические исследования I этапа: разработка математической модели процессов замерзания воды в трещинах океанических льдов при учете турбулентных течений жидкости в океане, теоретическое решение разработанной модели;

Обзор научных информационных источников по тематике проблемы за период 1998 – 2008 гг (с учетом процессов развития ложного (второго) дна);

Написание аналитического обзора по исследуемой проблеме с оценкой вариантов возможных решений проблемы (с учетом процессов развития ложного (второго) дна);

Выбор и обоснование оптимального варианта направления исследований, разработка плана проведения исследований (с учетом процессов развития ложного (второго) дна);

Теоретические исследования I этапа: разработка математической модели процессов замерзания воды в трещинах океанических льдов при учете турбулентных течений жидкости в океане, теоретическое решение разработанной модели (с учетом процессов развития ложного (второго) дна).

На втором этапе были выполнены следующие работы по проекту:

Теоретические исследования II этапа: расчет поправок к тепловому потоку, вызванному процессами замерзания воды, который испускается с поверхности льда в

атмосферу (на основе результатов I этапа);

Подготовка публикаций результатов исследований для зарубежных журналов или рекомендованных ВАК по проблеме процессов замерзания воды в трещинах океанических льдов при учете турбулентных течений жидкости в океане;

Теоретические исследования II этапа: разработка математической модели влияния волновых течений жидкости на процессы роста и структуру океанических льдов с учетом его пористости; анализ морфологической устойчивости этой модели с учетом наличия переходной области фазового перехода;

Подготовка публикаций результатов исследований для зарубежных журналов или рекомендованных ВАК по проблеме влияния волновых течений жидкости на процессы роста океанических льдов.

На третьем этапе были выполнены следующие работы по проекту:

Теоретические исследования III этапа: разработка математической модели дендритного роста льда при учете турбулизации жидкости на его поверхности. Разработка математической модели кристаллизации воды в трещинах льдов с учетом процессов образования и роста ложного дна. Теоретическое решение разработанных моделей;

Подготовка публикаций результатов исследований для зарубежных журналов или рекомендованных ВАК по проблемам дендритного роста льда при учете турбулизации жидкости и кристаллизации воды в трещинах льда с учетом роста ложного дна;

Обобщение и оценка результатов исследований в сравнении с современным научно-техническим уровнем;

Разработка рекомендаций по использованию результатов НИР при создании научно-образовательных курсов. Методическое обеспечение образовательного процесса;

Разработка рекомендаций по возможности использования результатов проведенных НИР в реальных секторах экономики.

Результаты всех выполненных работ вошли в соответствующие отчеты.

Научными результатами стало выполнение следующих конкретных работ (с учетом дополнительных работ).

На основании анализа литературных источников и проведения прогнозных исследований были выбраны оптимальные методы решения рассматриваемых проблем (с

учетом дополнительных работ, учитывающих развитие ложного (второго) дна).

Были разработаны математическая модель и метод ее решения для процессов замерзания воды в трещинах океанических льдов при учете турбулентных течений жидкости в океане и протяженной области фазового перехода (области совместного существования твердой и жидкой фаз) – двухфазной зоны. Математическая модель была разработана на основе работ коллектива авторов по данной проблеме (Д.В. Александров, А.П. Малыгин // Доклады АН, 2006, Т. 411, N 3, С. 390-394; Д.В. Александров, И.Г. Низовцева, Доклады АН // 2008, Т. 419, N 2, С. 262-265; D.V. Alexandrov, A.P. Malygin, I.V. Alexandrova // Annals of Glaciology, 2006, V. 44, P. 118-122), где была разработана модель и метод ее решения для изотермического океана и идеальных условий процесса – без учета течений жидкости и ее турбулизации вблизи растущей границы зоны льда и океана.

На основе методов решения, развитых в этих работах был разработан метод решения задачи при учете турбулентных течений жидкости в океане и его неизотермичности. Были определены распределения температуры и солености, доли твердой фазы в области фазового перехода, исследована динамика положений границ фазового перехода лед – двухфазная зона и двухфазная зона – океан. Эти характеристики процесса позволили рассчитать поправки к тепловому потоку, исходящему с поверхности льда в атмосферу, которые вызваны замерзанием воды в трещинах льда.

Данные исследования были проведены с учетом дополнительных работ, учитывающих развитие ложного (второго) дна).

Были разработаны математическая модель и методы ее решения для исследования влияния волновых течений жидкости на процессы роста океанических льдов (на межфазную границу лед – морская вода) при учете пористости льда, протяженной области фазового превращения, неоднородного распределения давления. Был произведен анализ морфологической устойчивости, который позволил определить критические значения частоты колебаний и волнового числа (в зависимости от параметров системы) при которых происходит наступление режима неустойчивости (при таком режиме роста льда происходит значительное изменение его структуры и проницаемости). Данные исследования базировались на работах коллектива авторов в данном направлении (Д.В. Александров, А.П. Малыгин // Доклады АН, 2006, Т. 411, N 3, С. 390-394; D.V. Alexandrov // J. Crystal Growth, 2001, V. 222, P. 816-821; D.V. Alexandrov, D.L. Aseev // J. Fluid Mech., 2005, V. 527, P. 57-66; D.V. Alexandrov, I.G. Nizovtseva // Int. J. Heat Mass Trans., 2008, V. 51, P. 5204-5208; Д.В. Александров // Доклады АН, 2008, Т. 422, N 3, С. 322-326). Такое исследование позволило определить потоки тепла и массы на границе лед – океан с учетом рассматриваемых

процессов (обычно в геофизических расчетах граница лед – океан считается гладкой).

Были разработаны математическая модель и методы ее решения для дендритного роста льда (роста отдельно взятых выступов) при учете турбулизации жидкости на его поверхности. Данное исследование позволило изучить динамику роста изолированных дендритных структур, растущих в переохлажденной морской воде, с учетом течений жидкости вблизи межфазной границы лед – океан. Были разработаны модели и методы их решения для кристаллизации воды в трещинах льдов с учетом процессов образования и роста ложного дна. Данные исследования базировались на предыдущих работах коллектива авторов в данном направлении (Д.В. Александров, А.О. Иванов // Доклады АН, 2002, Т. 385, N 3, С. 323-327; D.V. Alexandrov, A.P. Malygin // Int. J. Heat Mass Trans., 2006, V. 49, P. 763-769; Д.В. Александров // ЖЭТФ, 2009, Т. 135, вып. 5, С. 942-950; Д.В. Александров, А.П. Малыгин // Доклады АН, 2006, Т. 411, N 3, С. 390-394; Д.В. Александров, И.Г. Низовцева, Доклады АН // 2008, Т. 419, N 2, С. 262-265). Были определены температурное поле, поле солености, положение межфазной границы, исследована эволюция переохлаждения в жидкости, определены поправки к тепловому потоку, вызванные совместным замерзанием воды в трещинах льда (в направлении океана) и ростом ложного дна (в обратном направлении). Такое исследование позволило изучить динамику роста дендритных структур льда в метастабильной переохлажденной морской воде и определить влияние ложного дна на замерзание воды в трещинах льда.

На основании этих работ были получены следующие конкретные результаты.

Сформулирована нелинейная математическая модель процесса тепло- и массопереноса, учитывающая наличие трех движущихся границ фазового перехода и турбулентных течений жидкости в морской воде у поверхности ложного дна. Аналитически получены точные решения нелинейной модели с учетом временных зависимостей температуры и солености воды на глубине и флуктуаций скорости трения; найдены распределения температуры и солености воды, доля твердой фазы, законы движения границ фазового перехода «морская вода - двухфазная зона», «двухфазная зона - талая вода» и «талая вода - лед». Определен тепловой поток на нижней границе ложного дна, который может изменять свое направление при временных осцилляциях температуры морской воды и скорости трения. Показано, что структурные переходы в толще льда связаны с процессами эволюции ложного дна.

Исследована нелинейная динамика замерзания морской воды в трещинах вековых

льдов Арктики и Антарктики. Развита и обоснована математическая модель, описывающая кристаллизацию молодых льдов (и других систем, практически полностью вытесняющих примесь), на основе представлений о равновесной двухфазной зоне. Данная модель, существенно отличающаяся от фронтальной модели и известных ранее подходов, адекватно описывает физическую картину процесса и хорошо согласуется с наблюдениями. В рамках развиваемой модели, впервые получено аналитическое решение нелинейной нестационарной проблемы кристаллизации морской воды при произвольных изменениях со временем температуры атмосферы на поверхности льда. Определен явный вид законов движения границ фазового перехода и протяженность двухфазной зоны. Граница фазового перехода лед - двухфазная зона сильно отстает от границы фазового перехода двухфазная зона - вода благодаря практически полному вытеснению льдом соли в окружающую его жидкую матрицу системы.

Развита математическая модель процессов замерзания морской воды в трещинах океанических льдов при учете турбулентных течений жидкости в океане. Предложена общая модель процесса, сделан ряд оценок и разработано упрощение этой модели, которое допускает построение аналитических решений. Данная модель, существенно отличающаяся от классической модели Стефана с плоской границей раздела фаз и известных ранее подходов, корректно описывает физическую картину процесса и хорошо согласуется с наблюдениями. В рамках развиваемой модели, получено аналитическое решение нелинейной нестационарной проблемы кристаллизации морской воды при произвольных изменениях со временем температуры атмосферы на поверхности льда. Проведено обобщение полученных решений на часто реализующийся на практике случай прироста льда со стороны океана (на случай зарождения и эволюции второго дна). Определен явный вид законов движения границ фазового перехода и протяженность двухфазной зоны. Граница фазового перехода лед - двухфазная зона сильно отстает от границы фазового перехода двухфазная зона - вода благодаря практически полному вытеснению льдом соли в окружающую его жидкую матрицу системы. На основе полученных аналитических решений задачи, определен явный вид тепловых потоков, испускаемых с поверхности льда в атмосферу благодаря выделению скрытой теплоты кристаллизации. Показано, что эти тепловые потоки сравнимы по величине с другими вкладами в результирующий тепловой поток системы океан – атмосфера.

В работе проведен анализ морфологической неустойчивости процесса кристаллизации с анизотропной и неоднородной областью фазового перехода при учете течений в жидкой фазе и конвективного переноса тепла и массы в двухфазной зоне. Теоретически рассмотрен механизм нарушения устойчивости процесса затвердевания, который заключается в

конвективном тепломассопереносе и течениях жидкости по каналам области фазового перехода. Проведен линейный анализ морфологической устойчивости с учетом возмущений скорости течения жидкости, диффузии примеси в двухфазной зоне и зависимости коэффициентов переноса от фазового состава. Найден декремент возмущений для анизотропной и неоднородной структуры двухфазной зоны, определены кривые нейтральной устойчивости процесса кристаллизации. Показано, что учет диффузии соли и увеличение неоднородности зоны фазового перехода расширяют область неустойчивости, а уменьшение анизотропии приводит к ее сужению. Определен новый критерий конвективно-морфологической неустойчивости процесса кристаллизации с протяженной областью фазового превращения, который существенно расширяет область неустойчивости при увеличении скорости течения жидкости в океане. Эта задача, решенная в рамках настоящего исследования, представляет собой существенный вклад в теорию структурно-фазовых превращений и определяет, например, такой важный параметр морского льда, как его рыхлость, а также моделирует процессы его разрушения, вызванные взаимодействием с океаном.

В работе рассмотрен рост изолированного дендрита в жидкую фазу системы при наличии в ней набегающего потока. Термодиффузионная модель процесса основана на стефановском приближении фронтальной границы между растущим кристаллом и окружающей его жидкостью и гидродинамических уравнениях Осеена. Из условия микроскопической разрешимости на основе линейного анализа устойчивости получен критерий устойчивого роста двумерного параболического дендрита с учетом анизотропии поверхностного натяжения на межфазной границе кристалл-расплав. Найденный критерий содержит ранее полученные критерии для роста изолированного дендрита в однокомпонентной среде с конвекцией жидкости и роста изолированного дендрита в неподвижной бинарной системе. Показано, что развиваемая теория справедлива при произвольных числах Рейнольдса и Пекле, определяемых скоростью набегающего на дендрит потока жидкости. Сделано обобщение теории на случай трехмерного дендритного роста.

Теория дендритного роста адаптирована для кристаллизации в двухфазной зоне трехкомпонентных систем. В основной области фазовый переход претерпевает основной компонент, а в котектической – два компонента. Разработан метод построения точных аналитических решений задачи в основной и котектической двухфазных зонах. Метод сводится к переходу в уравнениях и граничных условиях модели к новой независимой переменной – доле жидкой фазы. На основе разработанного метода получены точные аналитические решения нелинейной системы уравнений с пограничными условиями на

неизвестных границах фазовых переходов. Найдены распределения температуры и концентраций примеси, доли твердой и жидкой фаз, скорость затвердевания и протяженности котектической и основной двухфазных зон. Показано, что концентрация примеси основного компонента убывает во всей области фазового превращения, а концентрация примеси второго примесного компонента имеет максимум в основной двухфазной области.

Теория дендритного роста в области фазового перехода обобщена на случай турбулизации жидкости в океане. В работе развита математическая модель процесса кристаллизации при наличии анизотропной и неоднородной области фазового превращения с учетом конвективного тепломассопереноса. Изложен механизм нарушения устойчивости процесса, заключающийся в конвективном переносе тепла и примеси по заполненным жидкостью каналам области фазового перехода. Проведен линейный анализ устойчивости с учетом течения среды в жидкой фазе системы, диффузии примеси в двухфазной зоне и зависимости коэффициентов переноса от фазового состава среды. Найден параметр эволюции возмущений для изотропной, однородной и анизотропной, неоднородной сред; получены кривые нейтральной устойчивости процесса. Показано, что учет диффузии примеси и увеличение неоднородности зоны фазового перехода расширяют область неустойчивости, а уменьшение анизотропии приводит к ее сужению. Получен новый критерий конвективной (морфологической) неустойчивости процесса кристаллизации с двухфазной зоной, который существенно увеличивает область неустойчивости при возрастании скорости конвективного течения расплава.

Разработана теория кристаллизации льда в трещинах от холодной границы с атмосферой, в которой учтены процессы роста второго слоя льда (ложного дна) снизу от океана к атмосфере вследствие проникновения талой воды в подледовое пространство в весенне-летний период времени. Показано что процессы кристаллизации сверху и снизу являются независимыми друг от друга вследствие того, что две зоны фазового перехода разделены между собой слоем пресной воды нулевой температуры. Определены распределения температуры, солености морской воды, доли твердой фазы в обоих двухфазных регионах. Найдены законы нестационарной миграции границ фазовых переходов и скорости их движения.

По результатам проекта были опубликованы следующие работы:

1. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. Solidification of a ternary melt from a cooled boundary, or nonlinear dynamics of mushy layers // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2009, Vol.

52, P. 4807-4811.

2. Александров Д.В. К теории процессов испарения в системе жидкость-кристалл // ЖЭТФ, 2009, Т. 136, вып. 3, С. 526-530.

3. Александров Д.В. Нелинейная динамика системы жидкость-кристалл при испарении летучего компонента // Доклады Академии Наук, 2009, Т. 428, N 4, С. 465-468.

4. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Nonlinear dynamics of directional solidification of ternary solutions with mushy layers // Heat Mass Transfer, 2009, Vol. 45, P. 1467-1472.

5. Александров Д.В., Малыгин А.П. Влияние конвекции, анизотропии и неоднородности среды на структурно-фазовые переходы в процессах кристаллизации // Доклады Академии Наук, 2010, Т. 434, N 3, С. 327-331.

6. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Lee D., Huang H.-N. Solidification from a cooled boundary with a mushy layer under conditions of nonturbulent and turbulent heat and mass transfer in the ocean // International Journal of Fluid Mechanics Research, 2010, Vol. 37, N 1, P. 1-14.

7. Александров Д.В., Галенко П.К., Малыгин А.П., Херлах Д.М. Отбор устойчивого режима роста вершины параболического дендрита при вынужденном конвективном течении и кристаллизации бинарной жидкости // Вестник Удмуртского университета, 2010, Вып. 1, С. 3-16.

8. Александров Д.В., Низовцева И.Г. Нестационарная кристаллизация воды с двухфазной зоной при турбулентных и нетурбулентных граничных условиях // Вестник Самарского государственного технического университета, Сер. физ.-мат. науки, 2010, N 1, С. 133-142.

9. Александров Д.В., Рахматуллина И.В., Малыгин А.П. К теории затвердевания с двухфазной зоной концентрационного переохлаждения // Расплавы, 2010, N 4, С. 88-96.

10. Александров Д.В., Асеев Д.Л., Малыгин А.П. К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной // Расплавы, 2011, N 1, С. 16-30.

11. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Convective instability of solidification with a phase transition zone // JETP, 2011, Vol. 112, N 4, P. 596-601.

12. Иванов А.А., Малыгин А.П. Нелинейные эффекты при направленной кристаллизации трехкомпонентных расплавов с образованием двухфазных зон // Расплавы (принята в печать).

По результатам работы были сделаны научные доклады на научных конференциях:

1. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V. Morphological instability of the solid-liquid interface during directional solidification of binary mixtures with a mushy layer: the case of channel formation // Proc. On CD ROM “The 21th International Symposium on Transport Phenomena”, Kaohsiung City, Taiwan, 2-5 November 2010, C06-28-01-08.

2. Александров Д.В., Малыгин А.П., Низовцева И.Г., Иванов А.А. Структурно-фазовые переходы при кристаллизации соленой воды: конвекция, анизотропия и неоднородность среды // XIX Всероссийская школа-конференция молодых ученых и студентов "Математическое моделирование в естественных науках", Пермь, 6 – 9 октября 2010, С. 6-8.

3. Александров Д.В., Нетреба А.В., Малыгин А.П. К теории направленной кристаллизации с зоной фазового перехода при наличии конвекции и кинетики в расплаве // Тезисы докладов, “XVII Зимняя школа по механике сплошных сред”, Пермь, 28 февраля – 3 марта 2011, Р. 22.

4. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Galenko P.K. Effect of a Forced Flow on 3D Dendritic Growth in Binary Systems // Proc. 8th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, 11 – 13 July 2011 Pointe Aux Piments, Mauritius, P. 299-304.

Результаты работы вошли в кандидатские диссертации коллектива научной группы И.Г. Низовцевой и А.А. Иванова.

Работы по проекту показали необходимость международного сотрудничества с Тангайским университетом (Тайвань) и Институтом физики материалов (Аэрокосмический центр, Германия).

1. Математическая модель дендритного роста льда при учете турбулизации жидкости на его поверхности. Теоретическое решение разработанной модели

Изолированный дендритный рост

Дендритный рост контролирует формирование кристаллической микроструктуры океанических льдов и различных материалов при их затвердевании [1, 2]. Отметим, что дендритные структуры составляют матрицу твердого вещества области фазового перехода, математические модели которой в контексте исследований данного этапа будут рассмотрены ниже. Наряду с экспериментальными наблюдениями динамики дендритного роста в последнее время получены качественно новые результаты теоретического моделирования для проверки основных концепций формирования дендритной морфологии (см. обзор [3] и литературные ссылки в нем). Среди рассматриваемых актуальных задач и их решений можно специально выделить задачу об устойчивом росте вершины свободно растущего дендритного кристалла и задачу о влиянии конвективного течения на механизм отбора режима роста дендрита. Эти задачи имеют самостоятельное теоретическое и практическое значение [4, 5].

Задача об отборе режима устойчивого роста дендритного кристалла возникла из анализа решения Иванцова [6-8] и экспериментальных тестов для роста иглообразного кристалла параболической формы [9-15]. Эти сравнения и тесты привели к заключению, что непрерывное семейство изотропных решений Иванцова неустойчиво: иглообразный кристалл теряет свою исходную параболическую форму в стационарном режиме роста (см. для обзора работу [16]). Поэтому решение Иванцова используется в качестве нулевого приближения для решения устойчивого роста в первом приближении, в котором роль малого параметра играет параметр анизотропии поверхностного натяжения или анизотропии кинетики роста [17].

После установления критерия устойчивого роста вершины дендрита в однокомпонентной неподвижной среде [16, 17] задача была расширена на случай конвективного движения среды [18-20] и на случай роста дендрита в бинарной (химически двухкомпонентной) системе без конвекции [21]. Во многих случаях, однако, необходимо проводить сравнительный анализ роста дендритов в бинарной системе с учетом конвективного течения [22]. Поэтому настоящая работа посвящена аналитическому исследованию задачи об отборе критерия устойчивости вершины растущего дендрита в бинарной системе с учетом вынужденного конвективного течения жидкости.

Постановка задачи сделана для расширенной модели Стефана с фронтальной межфазной поверхностью и анизотропным поверхностным натяжением на парболической границе раздела кристалл-жидкость. Задача для вынужденного течения решается в приближении Осеена. В рамках такой обобщенной задачи анализ устойчивого режима приводит к критерию для роста вершины дендритного кристалла в бинарной системе с учетом конвекции.

Процесс роста кристалла в набегающем потоке жидкости описывается нелинейной термодиффузионной задачей типа Стефана [23, 24] с движущейся вглубь расплава границей фазового перехода. Температура T_i межфазной границы кристалл - жидкость зависит от ее локальной кривизны $1/R$, температуры кристаллизации чистого вещества T_0 , коэффициента поверхностного натяжения σ и скрытой теплоты кристаллизации Q

$$T_i = T_0 - \frac{T_0 \sigma}{QR}. \quad (1)$$

Температурное поле в твердой и жидкой фазах при учете набегающего на кристалл потока жидкости описывается следующими уравнениями теплопроводности

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = D_T \Delta T_s, \quad \frac{\partial T_l}{\partial t} + (w, \nabla) T_l = D_T \Delta T_l, \quad (2)$$

где T_s и T_l - температуры твердой и жидкой фаз, D_T - коэффициент температуропроводности, w - скорость течения жидкости, t - время, Δ - оператор Лапласа.

Распределение примеси в жидкой части системы описывается конвективным уравнением диффузии (диффузией примеси в растущем кристалле пренебрегается)

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} + (w, \nabla) C_l = D_C \Delta C_l, \quad (3)$$

где C_l - концентрация растворенной в жидкости примеси, а D_C - ее коэффициент диффузии.

На подвижной границе раздела фаз выполняются условия равенства температуры поверхности температуре фазового перехода, непрерывности температуры, а также условия баланса тепла и массы

$$T_l = T_i - mC_l, \quad T_s = T_l, \quad Qv \cdot n = D_T c_p (\nabla T_s - \nabla T_l) \cdot n, \quad (4)$$

$$(1 - k_0)C_l v \cdot n + D_C \nabla C_l \cdot n = 0, \quad (5)$$

где $v \cdot n$ - нормальная скорость движения поверхности, c_p - теплоемкость, k_0 и m - равновесные коэффициенты распределения примеси и наклона линии ликвидус. Следуя работе [20], будем рассматривать течение жидкости при малых числах Рейнольдса. В этом случае распределение скорости в жидкости удовлетворяет уравнениям Осеена (Oseen) и непрерывности [25]

$$U \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_l} \nabla p + \nu \Delta w, \quad \nabla \cdot w = 0. \quad (6)$$

Здесь U - скорость набегающего потока жидкости вдали от растущего кристалла, ρ_l и ν - плотность и коэффициент вязкости жидкости соответственно. Отметим, что приближение Осеена, принятое в уравнении движения (6), дает возможность учесть лишь важнейшие из инерционных членов при получении достаточно точных результатов расчетов (см., например, классическую задачу о движении сферы в вязкой жидкости [26]).

Примем, что двухмерный дендрит параболической формы растет с постоянной скоростью V вдоль пространственной оси z (рис. 1). Поток жидкости вдали от кристалла направлен параллельно оси z и противоположно направлению роста дендрита (так называемый «набегающий поток»). Введем параболические координаты ξ и η , связанные с декартовыми координатами x и z следующими соотношениями:

$$x = \frac{\rho}{2} \sqrt{\xi \eta}, \quad z = \frac{\rho}{2} (\eta - \xi), \quad (7)$$

где ρ - радиус вершины дендрита, а межфазная граница находится на уровне $\eta = 1$ (обобщение на трехмерный случай будет сделано ниже).

Уравнения (6) позволяют определить компоненты скорости жидкости u_η и u_ξ в параболических координатах (7). Следуя работе [20], запишем результат в виде

$$u_\eta = -\frac{f(\eta)}{2\sqrt{\xi+\eta}}, \quad u_\xi = \frac{\sqrt{\xi\eta}}{\sqrt{\xi+\eta}} \frac{df}{d\eta}, \quad (8)$$

где введены определяющие функции

$$f(\eta) = 2(U+V)\sqrt{\eta} - 2Ug(\eta),$$

$$g(\eta) = \sqrt{\eta} \frac{\operatorname{erfc}\sqrt{\eta Re/2}}{\operatorname{erfc}\sqrt{Re/2}} + \frac{\sqrt{2/(\pi Re)}}{\operatorname{erfc}\sqrt{Re/2}} [\exp(-Re/2) - \exp(-\eta Re/2)],$$

учитывающие интенсивность течения по величине числа Рейнольдса $Re = \rho_1 U / \nu$.

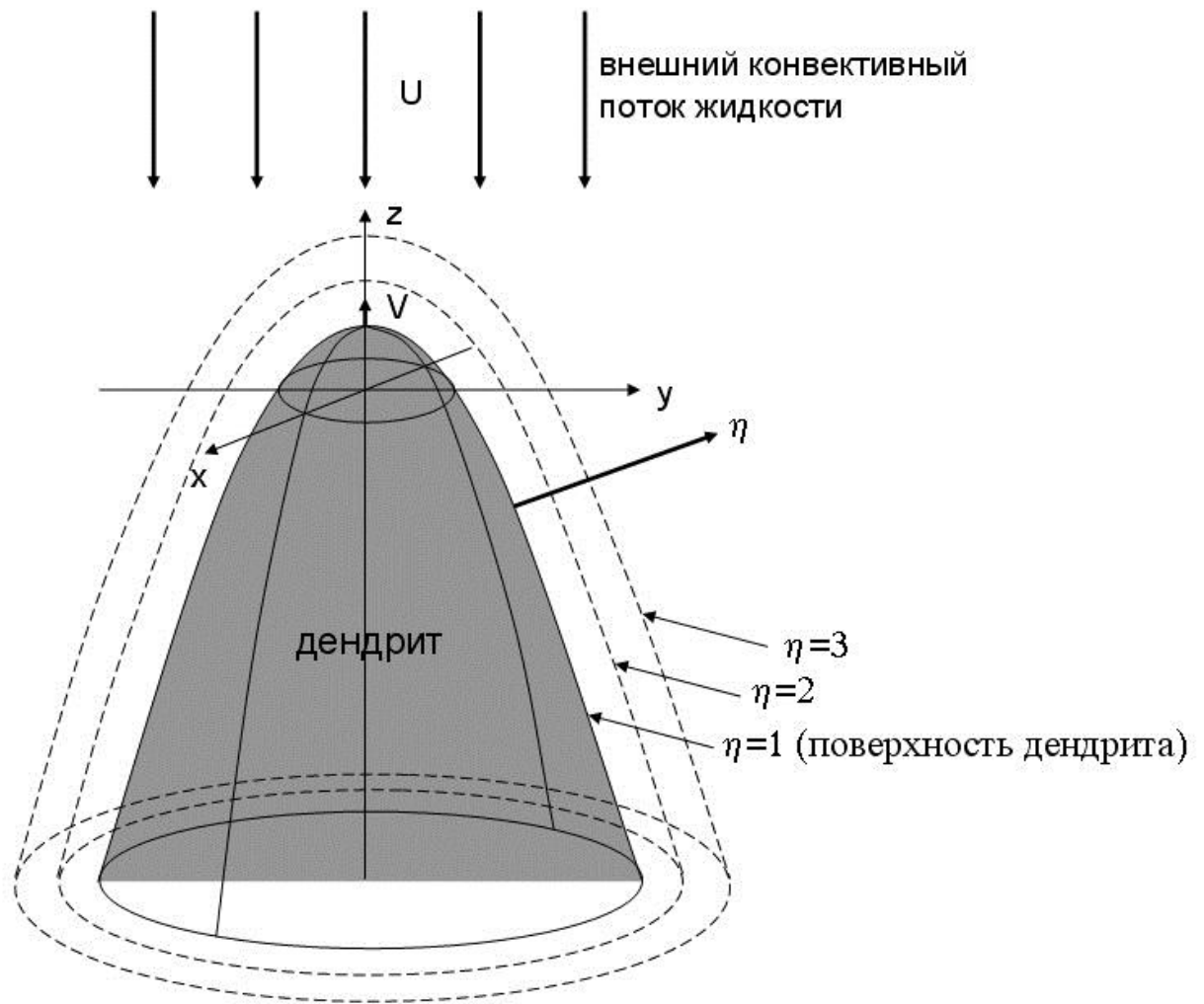


Рис. 1. Дендрит в набегающем потоке жидкости.

Уравнения (2) и (3) могут быть проинтегрированы в параболических координатах (7). Отыскивая решение задачи, зависящее только от координаты η , перепишем уравнения (2) и (3) с граничными условиями (4) и (5) в параболических координатах (см. работу [19])

$$u_\eta \frac{dT_l}{d\eta} = \frac{2D_T}{\rho\sqrt{\xi+\eta}} \left(\sqrt{\eta} \frac{d^2T_l}{d\eta^2} + \frac{1}{2\sqrt{\eta}} \frac{dT_l}{d\eta} \right), \quad \left(\frac{dT_l}{d\eta} \right)_{\eta=1} = -\frac{Q}{c_p} \frac{\rho V}{2D_T}, \quad (9)$$

$$u_\eta \frac{dC_l}{d\eta} = \frac{2D_C}{\rho\sqrt{\xi+\eta}} \left(\sqrt{\eta} \frac{d^2C_l}{d\eta^2} + \frac{1}{2\sqrt{\eta}} \frac{dC_l}{d\eta} \right), \quad \left(\frac{dC_l}{d\eta} \right)_{\eta=1} = -(1-k_0)C_i \frac{\rho V}{2D_C}, \quad (10)$$

где C_i - концентрация примеси на межфазной границе кристалл - расплав. Решая уравнения (9) и (10), получим распределения температуры и концентрации примеси

$$T_l(\eta) = T_i + (T_\infty - T_i) \frac{I(\eta)}{I(\infty)}, \quad C_l(\eta) = C_i + (C_\infty - C_i) \frac{I_1(\eta)}{I_1(\infty)}, \quad (11)$$

где введены следующие обозначения

$$I(\eta) = \int_1^\eta \exp \left[P_f \int_1^{\eta'} \frac{g(\eta'')}{\sqrt{\eta''}} d\eta'' - (P_f + P_g) \eta' \right] \frac{d\eta'}{\sqrt{\eta'}},$$

$$I_1(\eta) = \int_1^\eta \exp \left[P_f \frac{D_T}{D_C} \int_1^{\eta'} \frac{g(\eta'')}{\sqrt{\eta''}} d\eta'' - (P_f + P_g) \frac{D_T}{D_C} \eta' \right] \frac{d\eta'}{\sqrt{\eta'}},$$

$$P_g = \frac{\rho V}{2D_T}, \quad P_f = \frac{\rho U}{2D_T},$$

$$T_i = T_\infty + \frac{Q}{c_p} P_g \exp(P_f + P_g) I(\infty),$$

$$C_i = \frac{C_\infty}{1 - (1 - k_0) \exp[(P_f + P_g) D_T / D_C] P_g I_1(\infty) D_T / D_C}.$$

Здесь P_g и P_f - ростовое и потоковое числа Пекле, соответственно определенные через скорость V роста дендрита и скорость U течения жидкости, T_∞ и C_∞ - температура и концентрация в жидкости вдали от границы раздела фаз.

В случае слабых эффектов поверхностного натяжения решения с постоянной скоростью роста дендрита могут быть найдены в окрестности классических решений параболического дендрита Иванцова, если выполняется условие микроскопической разрешимости. Это условие позволяет отобрать устойчивый режим роста дендрита через скорость V и радиус ρ вершины анизотропного дендрита (т.е. при наложенной симметрии кристаллической решетки, учитывающей анизотропию преимущественного направления роста кристалла) [16, 17]. Далее будем использовать условие микроскопической разрешимости, полученное в работе [27]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G[X_0(l)]Y_m(l)dl = 0, \quad Y_m(l) = \exp\left[i\int_0^l k_m(l_1)dl_1\right]. \quad (12)$$

Это выражение может быть использовано для анализа различного вида подвижных границ фронтального типа (например, ``вязких пальцев" Сафмана-Тэйлора [16, 28]). Для этого нужно знать оператор кривизны G и решения $X_0(l)$, которые дают функции $k_m(l)$ локальной ненулевой маргинальной моды сопряженного дисперсионного уравнения для возмущений (см., например, [28]). Само выражение (12) выводится с помощью метода Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ-метода [29]), который был применен для нахождения режимов распространения фронтов пламени [30] и дендритной структуры [31]. Ниже определены элементы $Y_m(l)$, входящие в соотношение (12) при наличии набегающего на дендрит потока бинарной жидкости в приближении уравнений Осеена.

Используем результаты линейного анализа устойчивости работы [20], где скорость роста возмущений имела длину волны много меньшую по сравнению с характерным пространственным масштабом невозмущенного решения. Разложим стационарные компоненты скорости (8) в ряды по $\eta - 1$ в окрестности параболы $\eta = 1$. Учитывая только основные вклады, получим

$$u_\xi = \sqrt{\frac{\xi}{1+\xi}}[V + a(Re)U(\eta-1)], \quad u_\eta = -\frac{V}{\sqrt{1+\xi}}, \quad (13)$$

где

$$a(Re) = \sqrt{\frac{Re}{2\pi}} \frac{\exp(-Re/2)}{\operatorname{erfc}(\sqrt{Re/2})}. \quad (14)$$

Из выражений (13) и (14) следует, что только касательная составляющая скорости u_ξ зависит от скорости набегающего потока жидкости в окрестности растущей параболической вершины дендрита.

Введем новые локальные декартовы координаты (x_c, y_c) , связанные с кристаллом, где x_c и y_c соответственно обозначают тангенциальную и нормальные оси к межфазной поверхности в точке, где нормаль к поверхности имеет с осью роста угол θ . Эти координаты позволяют представить выражения (13) через θ и y_c в виде

$$\bar{u} = -V \sin \theta - \frac{aU}{\rho} \sin \theta \cos \theta y_c, \quad \bar{v} = -V \cos \theta, \quad (15)$$

где \bar{u} и \bar{v} обозначают тангенциальную и нормальную к поверхности компоненты скорости. Выражая производные температуры и концентрации из уравнений (4) и (5)

$$\frac{d\bar{T}_l}{dy_c} = \frac{Q\bar{v}}{D_T c_p}, \quad \frac{d\bar{C}_l}{dy_c} = \frac{C_i(1-k_0)\bar{v}}{D_C}, \quad y_c = 0, \quad (16)$$

находим разложение температуры и концентрации в ряды в окрестности вершины дендрита

$$\bar{T}_l = T_0 - \frac{QV}{D_T c_p} \cos \theta y_c, \quad \bar{C}_l = C_i - \frac{C_i(1-k_0)V}{D_C} \cos \theta y_c. \quad (17)$$

Обозначим через u' , v' и T' возмущения соответствующих величин, а через ξ' - возмущение стационарной межфазной поверхности с длиной волны λ (которая много меньше, чем радиус ρ вершины дендрита). Решение уравнений для возмущений, получаемое из выражений (2) и (6) в приближении Осеена, может быть представлено в виде

$$u' = -i\varepsilon\omega\Sigma\exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c), \quad v' = -\omega\Sigma\exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c),$$

$$\xi' = \Sigma\exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c), \quad T'_s = T_{s0}\exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c), \quad (18)$$

где учтено выражение $v' = -\partial\xi'/\partial t$, выполняющееся на межфазной поверхности. Здесь ω и k - частота и волновое число возмущений соответственно, параметр ε имеет тот же знак, что и вещественная часть k поскольку возмущения не могут неограниченно возрастать при y_c идущим к $+\infty$, Σ и T_{s0} - амплитуды возмущений поверхности и температуры в твердой фазе.

Рассмотрим уравнение для температурных возмущений в жидкой части системы. Удерживая лишь линейные слагаемые, из (2) будем иметь

$$\frac{\partial T'_l}{\partial t} + u' \frac{\partial T'_l}{\partial x_c} + v' \frac{\partial T'_l}{\partial y_c} + v' \frac{dT'_l}{dy_c} = D_r \left(\frac{\partial^2 T'_l}{\partial x_c^2} + \frac{\partial^2 T'_l}{\partial y_c^2} \right). \quad (19)$$

Если скорость набегающего потока на дендрит пренебрежимо мала, решение имеет вид, подобный T'_s при больших k . Такое решение согласуется с известным критерием Маллинза-Секерки [12] при k , определенном в соответствии с тепловой задачей затвердевания чистого расплава (см, например, [20]). Подставляя

$$T'_l = g(y_c)\exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon ky_c) \quad (20)$$

в уравнение (19) и учитывая соотношения (11), можно получить следующее уравнение для амплитуды $g(y_c)$

$$\frac{d^2 g}{dy_c^2} - 2\varepsilon k \frac{dg}{dy_c} = L(g(y_c), y_c), \quad (21)$$

где

$$L(g(y_c), y_c) =$$

$$\left[\omega + kV\varepsilon \exp(-i\varepsilon\theta) - \frac{iaUk \sin \theta \cos \theta}{\rho} y_c \right] \frac{g(y_c)}{D_T} + \frac{\omega QV \cos \theta}{c_p D_T^2} \Sigma. \quad (22)$$

Будем искать решение уравнения (21) в окрестности решения Маллинза-Секерки [12] с постоянной амплитудой $g(y_c) = T_{l0} = \text{const}$. Подстановка T_{l0} в правую часть (21) дает первое приближение для $g(y_c)$

$$g(y_c) = T_{l0} - \left[\left(\frac{\omega}{2\varepsilon k} + \frac{V}{2} \exp(-i\varepsilon\theta) - \frac{aU \sin \theta \cos \theta}{4k\rho} i \right) \frac{T_{l0}}{D_T} + \frac{\omega QV \cos \theta}{2D_T^2 c_p \varepsilon k} \Sigma \right] y_c + \frac{aU \sin \theta \cos \theta}{4\varepsilon \rho D_T} iT_{l0} y_c^2, \quad (23)$$

где учтено сильное неравенство $V/D_T = k$ (здесь k оценивается по теории Маллинза-Секерки как 10^7 м^{-1} [12], а V/D_T как 10^2 м^{-1} для бинарных металлических систем).

Уравнение (3), записанное для возмущений концентрационного поля C'_l в жидкости, решается аналогичным образом

$$C'_l = h(y_c) \exp(\omega t + ikx_c - \varepsilon k y_c),$$

$$h(y_c) = C_{l0} - \frac{aUk \sin \theta \cos \theta}{2\rho D_c (V \cos \theta / D_c - 2\varepsilon k)} iC_{l0} y_c^2 +$$

$$+ \left\{ \left[\omega + V\varepsilon \exp(-i\varepsilon\theta) + \frac{aUk \sin \theta \cos \theta}{V \cos \theta / D_c - 2\varepsilon k} \frac{i}{\rho} \right] \frac{C_{l0}}{D_c} + \right.$$

$$\left. + \frac{\omega C_i (1 - k_0) V \cos \theta}{D_c^2} \Sigma \right\} \frac{y_c}{V \cos \theta / D_c - 2\varepsilon k}. \quad (24)$$

Возмущая теперь граничные условия (4) и (5), получаем следующие соотношения на

межфазной границе $y_c = 0$

$$T'_l = \frac{QV \cos \theta}{D_T c_p} \xi' - mC'_l + \frac{mC_i(1-k_0)V \cos \theta}{D_c} \xi' - \frac{Qd}{c_p} \frac{\partial^2 \xi'}{\partial y_c^2},$$

$$T'_s = mC'_l - \frac{mC_i(1-k_0)V \cos \theta}{D_c} \xi' + \frac{Qd}{c_p} \frac{\partial^2 \xi'}{\partial y_c^2},$$

$$\frac{Q}{c_p} \frac{\partial \xi'}{\partial t} = D_T \left(\frac{\partial T'_s}{\partial y_c} - \frac{\partial T'_l}{\partial y_c} - \frac{QV^2 \cos^2 \theta}{D_T^2 c_p} \xi' \right),$$

$$\frac{1-k_0}{D_c} (C_i v' - V \cos \theta C'_l) = \frac{\partial C'_l}{\partial y_c} + \frac{C_i k_0 (1-k_0) V^2 \cos^2 \theta}{D_c^2} \xi', \quad (25)$$

где $d = \sigma_p T_0 / Q^2$ обозначает капиллярную длину. Подстановка возмущений (18), (20) и (24) в граничные условия (25) дает четыре уравнения для амплитуд возмущений Σ , T_{l0} , T_{s0} и C_{l0} .

Исключая из уравнений (25) амплитуды температурных возмущений, получим следующие соотношения между амплитудами возмущений концентрации примеси и координаты межфазной границы

$$\left[\frac{(1-k_0)\omega C_i}{D_c} + \frac{k_0 C_i q_3 V \cos \theta}{D_c} + \frac{\omega C_i q_1 q_3}{D_c (q_1^2 + q_2)} \right] \Sigma = \quad (26)$$

$$\left[\varepsilon k - q_3 - \frac{q_1 q_2 + k q_4 D_T / D_c}{q_1^2 + q_2} \right] C_{l0},$$

$$\left[2m\varepsilon k + m q_5 + m q_6 - \frac{m q_4}{4k} \right] C_{l0} = \left[q_5 q_7 - \frac{\varepsilon Q d k^3}{c_p} + m C_i q_3 \varepsilon k + \quad (27)$$

$$\left(q_5 + q_6 - \frac{q_4}{4k} + \varepsilon k \right) \left(m C_i q_3 - \frac{Q d k^2}{c_p} + q_7 \right) - \frac{Q \omega}{D_T c_p} - \frac{q_7 V \cos \theta}{D_T} \right] \Sigma,$$

где

$$q_1 = \frac{V \cos \theta}{D_c} - 2\varepsilon k, q_2 = \frac{\omega + V\varepsilon k \exp(-i\varepsilon\theta)}{D_c}, q_3 = \frac{(1-k_0)V \cos \theta}{D_c},$$

$$q_4 = \frac{iaU \sin \theta \cos \theta}{\rho D_T}, q_5 = \frac{\omega}{2\varepsilon k D_T}, q_6 = \frac{V \exp(-i\varepsilon\theta)}{2D_T}, q_7 = \frac{QV \cos \theta}{D_T c_p}.$$

Рассмотрим систему координат, чье начало движется в направлении нормали к межфазной границе со скоростью $V \cos \theta$. Вследствие вращательной симметрии системы, возмущение с волновым числом k растет со скоростью $\omega(k)$. Если теперь начало системы координат движется в направлении оси z с постоянной скоростью V , скорость роста возмущения будет $\omega(k) + iVk \sin \theta$ благодаря тангенциальной скорости новой системы координат $V \sin \theta$ [21]. Поэтому заменяя $\omega(k)$ через $-iVk \sin \theta$ на кривой нейтральной устойчивости, исключая амплитуды возмущений, полагая $\varepsilon = -1$ и переобозначая i на $-i$ согласно работе [20], получим уравнение для определения волнового числа k .

$$k^4 - \frac{V}{2dD_T} \left[P \exp(i\theta) + \frac{iaUd \sin \theta \cos \theta}{4\rho V} \right] k^2 + \frac{iq_3 m C_i a U \sin \theta \cos \theta}{4\rho d D_c Q / c_p} = 0. \quad (28)$$

При записи выражения (28) учтены следующие оценки $k : 10^7 \text{ м}^{-1}$, $V/D_T : 10^2 \text{ м}^{-1}$, $V/D_c : 10^6 \text{ м}^{-1}$, $U : V$, $d : 10^{-10} \text{ м}$, $\rho : 10^{-5} \text{ м}$, а также введено обозначение

$$P = 1 + \frac{2mC_i(1-k_0)D_T}{D_c Q / c_p}.$$

Решение уравнения (28) будем искать в окрестности решения упрощенной задачи при отсутствии набегающего потока жидкости, найденного в работе [21]. Представляя капиллярную длину в виде $d(\theta) = d_0(1 - \beta \cos 4\theta)$ ($\beta = 15\varepsilon_c = 1$ - фактор анизотропии, ε_c - параметр анизотропии поверхностной энергии на межфазной границе, d_0 капиллярная константа) и вводя волновое число $k_{TC} = -\sqrt{VP/(2d_0 D_T)}$, соответствующее решению термоконцентрационной задачи без течения (см., например, работу [21]), решение уравнения

(28) запишем в виде

$$k = k_{TC} \sqrt{\frac{\exp(i\theta) + i\alpha_0 Z(\theta)(1 - \beta \cos 4\theta) \sin \theta \cos \theta}{1 - \beta \cos 4\theta}}, \quad (29)$$

где

$$\alpha_0 = \frac{aUd_0}{4P\rho V}, \alpha_1 = \frac{4(1-k_0)mC_i D_T^2}{PD_c^2 Q/c_p}, Z(\theta) = 1 - \alpha_1 \cos \theta \exp(-i\theta).$$

Выражение (29) содержит все предельные переходы к ранее развитым теориям дендритного роста в работах [12, 20, 21, 27, 28].

Полагая сначала $U = 0$ и $C_i = 0$ в (29), получаем волновое число k_{MS} Маллинза и Секерки для однокомпонентного расплава без набегающего потока жидкости [12, 20, 27, 28]

$$k_{MS} = -\sqrt{\frac{V \exp(i\theta/2)}{2dD_T}}.$$

Далее, при $U = 0$ решение (29) приводит к волновому числу k_{BAP} Бен Амар и Пелсе для бинарного расплава без набегающего потока жидкости [21]

$$k_{BAP} = k_{MS} \sqrt{P}.$$

Теперь считая, что $C_i = 0$, находим решение k_{BP} Буассу и Пелсе для однокомпонентного расплава при наличии набегающего потока жидкости [20]

$$k_{BP} = k_{MS} \sqrt{1 + \frac{iadU \sin \theta \cos \theta \exp(-i\theta)}{4\rho V}}.$$

Выражение (29) обобщает приближенную теорию работ [32, 33], развитую для бинарного расплава при наличии набегающего потока жидкости в случае, когда $mC_i \gg Q/c_p$ и $P:1$ (в работах [32, 33] предельный переход к однокомпонентной системе существует только при

$D_C \rightarrow \infty$, а переход при $C_i \rightarrow 0$ является некорректным в силу использованных оценок). Выражение (29) устраняет этот недостаток и содержит предельный переход $C_i \rightarrow 0$ к выражению, полученному в работе [20].

Важным обстоятельством является то, что выражение (29) в качестве предельного случая содержит в себе новый результат. Эта ситуация описывает рост дендрита в изотермической бинарной системе при наличии набегающего потока жидкости, так называемый случай «химического дендрита». Полагая $P_1 \equiv mC_i(1-k_0)c_p/Q \gg 1$ в выражении (29), находим волновое число k_{CD} «химического дендрита»

$$k_{CD} = -\sqrt{\frac{VP_1}{dD_C} \left[\exp(i\theta) - \frac{iaUd \sin \theta \cos^2 \theta \exp(-i\theta)}{4(1-k_0)\rho P_1 V} \right]}.$$

Итак, обобщенное решение (29) дает критическое волновое число для возмущений на вершине дендрита в рамках термо-концентрационной задачи с учетом встречного потока жидкости, натекающего на дендрит.

При получении критерия устойчивого роста дендрита будем использовать теорию отбора решения, развитую в работах [20, 27, 28]. Принимая во внимание, что

$$l = -\frac{\rho}{2} \left[\frac{\tan \theta}{\cos \theta} + \ln \left(\frac{1}{\cos \theta} + \tan \theta \right) \right]$$

(см., например, [27]), условие разрешимости (12) по аналогии с работой [20] запишем в виде

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(\chi) \exp[\sqrt{C} \Psi_\alpha(\chi)] d\chi = 0, \quad \chi = \tan \theta, \quad (30)$$

где

$$\Psi_\alpha(\chi) = \frac{i}{2} \int_0^\chi \frac{[(1+i\chi')(1+\chi'^2)^{5/2} + i\alpha(\chi')\chi'B(\chi')]}{\sqrt{B(\chi')}} d\chi',$$

$$B(\chi) = (1+\chi^2)^2(1-\beta) + 8\beta\chi^2, \quad \alpha(\chi) = \alpha_0 \left(1 + \frac{i\alpha_1\chi}{1+i\chi} \right), \quad (31)$$

а константа C нормирована на безразмерный множитель $VP\rho^2/(2d_0D_T)$.

Оценим интеграл (30) в пределе малой анизотропии методом, развитым в работе [20]. Числитель подынтегральной функции обращается в ноль при χ близком к $\chi = i$ (стационарная фазовая точка), а знаменатель - при $\chi = i(1 - \sqrt{2\beta})$ (точка сингулярности). Поскольку главный вклад в интеграл дается окрестностью точки $\chi = i$, функция $\Psi_\alpha(\chi)$ может быть приближена следующим выражением

$$\Psi_\tau(\varphi) = 2^{9/8} \beta^{7/8} \int_{1/\sqrt{2\beta}}^{\varphi} \frac{[\varphi'^{7/2} - \tau(\varphi'^2 - 1)\Phi(\varphi')]^{1/2}}{\sqrt{\varphi'^2 - 1}} d\varphi', \quad (32)$$

в котором приняты следующие обозначения

$$\chi = i(1 - \sqrt{2\beta}\varphi), \tau = 2^{-5/4} \beta^{-3/4} \alpha_0, \Phi(\varphi') = \left[1 - \frac{i\alpha_1}{\sqrt{2\beta}\varphi'} \right].$$

Интеграл (32) может быть рассчитан с помощью приближенных методов, развитых в работе [20] при анализе подобной задачи для роста дендрита в однокомпонентной системе с конвективным течением. Следуя этой работе, определим величину C как

$$C = \frac{n^2}{\beta^{7/4}} \left[1 + b(\beta^{-3/4} \alpha_0)^{11/14} \right] \quad (33)$$

где n - целое число и b - константа, определяемая численно. Теперь учет нормировки в интеграле (32) приводит к выражению для масштабного фактора σ^* «нехимического дендрита»

$$\sigma^* \equiv \frac{2d_0D_T}{\rho^2V} = \sigma_0 \beta^{7/4} P \left[1 + b(\beta^{-3/4} \alpha_0 \delta)^{11/r} \right]^{-1}, \quad (34)$$

и для масштабного фактора «химического дендрита»

$$\sigma^* \equiv \frac{2d_0 D_c}{\rho^2 V} = 2\sigma_0 \beta^{7/4} P_1 \left[1 + b(\beta^{-3/4} \alpha_0 \delta)^{11/r} \right]^{-1}, \quad (35)$$

где $\delta = \alpha_1 / \sqrt{2\beta}$, $r = 18$ в случае «химического дендрита» и $\delta = 1$, $r = 14$ в остальных случаях, σ_0 - численная постоянная, определяемая с помощью асимптотических методов [17] или с помощью совмещения модельных предсказаний и экспериментальных значений [34, 35].

Выражения (34) и (35) являются центральным результатом развиваемой теории. Они определяют критерии для устойчивой моды роста вершины дендрита с учетом анизотропии поверхностной энергии (параметр β), неизотермичности бинарной жидкости и набегающего потока жидкости. Критерий (34) объединяет ранее полученные результаты: модель из работы [20] для неизотермической однокомпонентной системы с набегающим потоком жидкости и модель из работы [21] для неизотермической бинарной системы без учета набегающего потока жидкости. Таким образом, выражение (34) является обобщением ранее полученных результатов.

Представим критерии (34) и (35) в относительной форме

$$\frac{\sigma^*}{\sigma^*|_{\alpha=0}} = \left[1 + b(\beta^{-3/4} \alpha_0 \delta)^{11/r} \right]^{-1}, \quad (36)$$

где $\sigma^*|_{\alpha=0}$ определено для дендритного роста без течения и составляет

$$\sigma^*|_{\alpha=0} = \frac{2(1-k_0)mC_i}{Q/c_p} \sigma_0 \beta^{7/4}$$

для «химического дендрита» и

$$\sigma^*|_{\alpha=0} = \sigma_0 \beta^{7/4} \left(1 + \frac{2D_T(1-k_0)mC_i}{D_c Q/c_p} \right)$$

для остальных рассматриваемых случаев. Рис. 2 показывает, что при уменьшении числа Пекле P_f , соответствующего течению жидкости, и при увеличении числа Пекле P_g , соответствующего затвердеванию, вклад конвекции в устойчивость вершины дендрита

уменьшается. При этом, случай «химического дендрита» при каждом фиксированном значении P_f , соответствующий изотермической системе, вносит наиболее существенный вклад в критерий устойчивости по сравнению с неизотермическими случаями.

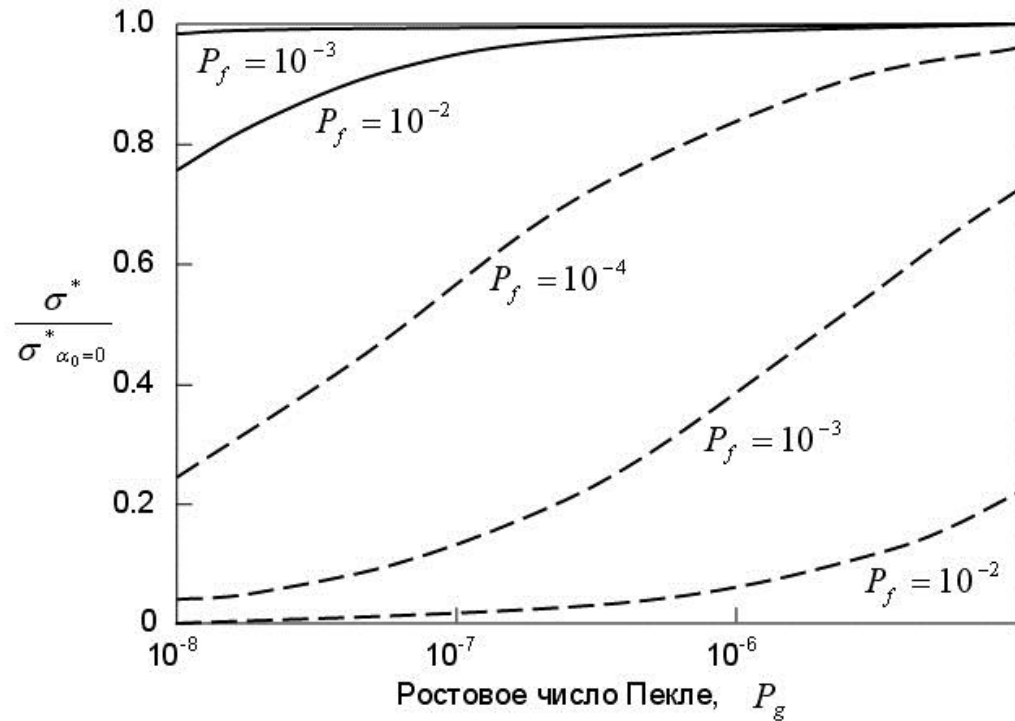


Рис. 2. Отношение $\sigma^*/\sigma^*(\alpha=0)$, определенное по выражениям (34) и (35), в зависимости от ростового числа Пекле $P_g = V\rho/(2D_T)$ при различных числах Пекле $P_f = U\rho/(2D_T)$. Значения используемых параметров: $D_T/\nu = 10$, $d_0/\rho = 10^{-5}$, $\beta = 0.195$, $D_T/D_C = 5 \cdot 10^3$, $k_0 = 0.5$, $C_\infty = 1$ ат.%, $m = 10$ К/ат.%, $Q/c_p = 300$, $b = 10$. Пунктирные линии описывают «химический дендрит», сплошные - общий случай.

Развиваемая в работе теория основывается на использовании приближенных уравнений Осена (6), справедливых, вообще говоря, при малых значениях числа Рейнольдса (а значит и числа Пекле). Это приближение используется с целью получения аналитического решения задачи об обтекании дендрита вязкой жидкостью. Из теории известно другое аналитическое решение задачи, получаемое при применении к процессу модели идеальной жидкости [19]. Это решение, справедливое при $Re \gg 1$, согласно работе [19] имеет следующий вид:

$$u_\eta = -\frac{(U+V)\sqrt{\eta}-U}{\sqrt{\xi+\eta}}, \quad u_\xi = \sqrt{\frac{\xi}{\xi+\eta}}(U+V). \quad (37)$$

Таким образом, известно решение двух асимптотических случаев: выражения (8) имеют место при $Re = \rho_1 U / \nu = 1$, а выражения (37) справедливы при $Re \gg 1$. Возникает естественный вопрос о виде решения рассматриваемой задачи для всех остальных ситуаций по числу Рейнольдса. Интересно отметить, что выражения (8), полученные для вязкой жидкости переходят в выражения (37), найденные для идеальной жидкости при $g = 1$. Функция g , также формально зависящая и от числа Рейнольдса $g = g(\eta, Re)$, стремится к единице при увеличении числа Рейнольдса (при $Re \rightarrow \infty$) при различных фиксированных значениях координаты $\eta > 1$. Это говорит о том, что решения (8), найденные для малых значений числа Рейнольдса, переходят в решения (37), найденные для больших значений числа Рейнольдса. Поскольку приближение Осеена (а значит и формулы (8)) хорошо согласуется с численным решением уравнений Навье-Стокса до значений числа Рейнольдса порядка единицы [18], можно считать, что выражения (8) адекватно описывают процесс в ламинарной области вынужденного течения в широком диапазоне значений Re , от малых величин до больших. Поэтому формальные ограничения, сужающие рамки применимости рассматриваемой теории по потоковым числам Рейнольдса $Re = \rho_1 U / \nu$ и Пекле $P_f = \rho U / (2D_T)$, снимаются с учетом вышесказанного для ламинарного набегающего потока жидкости.

Представляется важным отметить то обстоятельство, что развиваемая теория остается справедливой и для трехмерного дендритного роста. Введем координаты параболоида вращения, ось z которого соответствует оси z для плоского случая, описываемого соотношениями (7)

$$z = \frac{\rho(\eta - \xi)}{2}, \quad x = \rho\sqrt{\xi\eta} \cos \varphi, \quad y = \rho\sqrt{\xi\eta} \sin \varphi,$$

где, по-прежнему, поверхность дендрита $\eta = 1$ имеет радиус вершина ρ , а φ - полярный угол, плоскость которого перпендикулярна набегающему вдоль оси z потоку жидкости. Компоненты скорости жидкости в этом случае примут следующий вид (аналог выражений (8)):

$$u_\eta = -\frac{f(\eta)}{\sqrt{\xi+\eta}}, u_\xi = \sqrt{\frac{\xi}{\xi+\eta}} \frac{d}{d\eta} (\sqrt{\eta} f(\eta)), u_\varphi = 0,$$

где

$$f(\eta) = (U+V)\sqrt{\eta} - Ug(\eta)/\sqrt{\eta},$$

$$g(\eta) = \eta \frac{E_1(\text{Re}\eta/2)}{E_1(\text{Re}/2)} + 2 \frac{\exp(-\text{Re}/2) - \exp(-\text{Re}\eta/2)}{\text{Re}E_1(\text{Re}/2)}, E_1(q) = \int_q^\infty \frac{\exp(-u)}{u} du.$$

Температурное и концентрационное поля описываются, как и ранее, выражениями (11), где

$$I(\eta) = \int_1^\eta \exp \left[2P_f \int_1^{\eta'} \frac{g(\eta'')}{\sqrt{\eta''}} d\eta'' - (P_f + P_g)\eta' \right] \frac{d\eta'}{\eta'},$$

$$I_1(\eta) = \int_1^\eta \exp \left[2P_f \frac{D_T}{D_c} \int_1^{\eta'} \frac{g(\eta'')}{\sqrt{\eta''}} d\eta'' - (P_f + P_g) \frac{D_T}{D_c} \eta' \right] \frac{d\eta'}{\eta'}.$$

Выражения (13) для компонент скорости также остаются в силе; изменяется лишь коэффициент a . Вместо соотношения (14) для трехмерного случая имеем

$$a(\text{Re}) = \frac{\exp(-\text{Re}/2)}{E_1(\text{Re}/2)}.$$

Во всех остальных формулах присутствует лишь зависимость от этого коэффициента. Поэтому выражения (29), (34) и (35), составляющие основной результат настоящей работы, сохраняются в трехмерном случае с заменой коэффициента $a(\text{Re})$.

В заключение отметим два существенных замечания. *Первое*, полученные критерии (34) и (35) устойчивого роста дендрита в бинарной системе с конвекцией могут быть протестированы в соответствии с результатами компьютерного моделирования. Это может, например, быть сделано аналогично моделированию методом фазового поля, ранее выполненном для свободного дендритного роста с конвекцией в однокомпонентной системе [36, 37]. Найденные критерии устойчивости могут быть также протестированы

экспериментально, как это сделано для дендритного роста с вынужденным течением прозрачной жидкости [38]. Второе, предложенная в настоящей работе теория и полученные критерие (34) и (35) все еще ограничены анализом относительно малых значений ростового числа Пекле $P_g = V\rho/(2D_T)$. Иными словами, теория справедлива лишь для значений малых градиентов или переохлаждений жидкости, обеспечивающих малые скорости роста V дендритного кристалла. Для расширенного анализа повышенных скоростей роста и произвольных чисел Пекле P_g требуется специально рассмотреть устойчивость высокоскоростных режимов дендритного затвердевания. Получение и анализ условия микроскопической разрешимости для высокоскоростного режима роста могут, например, быть сделаны аналогично анализу, выполненному в рамках гипотезы маргинальной устойчивости [39, 40].

Дендритный рост в области фазового перехода

Хорошо известно, что наличие соли в морской воде или в более общей постановке – примеси в расплаве кардинальным образом изменяет различные характеристики процесса кристаллизации расплавов и растворов [41-43]. Одним из наиболее значимых эффектов, возникающих в процессах затвердевания является концентрационное переохлаждение, впервые обнаруженное в работе [44] (механизм возникновения данного типа переохлаждения и его особенности по сравнению с термическим переохлаждением подробно описаны в работе [45], а также продемонстрированы в Приложении). Проведенное в работах [46, 47] численное моделирование затвердевания от охлаждаемой стенки и развитая в работах [48, 49] приближенная теория этого процесса показали, что концентрационное переохлаждение возникает достаточно быстро после начала процесса кристаллизации (времена его возникновения составляют порядка нескольких минут). После того, как перед границей фазового перехода твердая фаза – раствор (или расплав) образовалась переохлажденная область, процесс затвердевания нельзя больше описывать в рамках классической термодиффузионной задачи Стефана с плоским фронтом [50]. Реакцией системы на образование концентрационного переохлаждения является формирование условий преимущественного роста отдельных выступов твердой фазы в глубь переохлажденного расплава. Другими словами, плоская фронтальная граница фазового перехода становится морфологически неустойчивой. Линейный анализ такой неустойчивости для кристаллизации плоского фронта с постоянной скоростью впервые был проведен в классических работах [51-53], а в работе [54] было дано его обобщение на случай локально-неравновесного затвердевания. Этот анализ показал, что в процессе кристаллизации существует область

параметров, в которой неустойчивость может приводить к возникновению сложных структур примесного распределения. Для расчета параметров таких структур была разработана нелинейная теория устойчивости плоской границы раздела фаз [55] (в работе [56] эта теория была применена для нелинейного анализа устойчивости поверхности разрыва, моделирующей область фазового перехода). Ростовые структуры твердой фазы в области фазового превращения, пространство между которыми заполнено переохлажденной жидкостью, образуют двухфазную область, которая располагается между чисто твердой и жидкой фазами системы. Процесс затвердевания при наличии такой области становится намного сложнее, чем фронтальный процесс. Так, например, в области фазового перехода может происходить как рост дендритных структур [32, 33], так и гомогенная нуклеация частиц твердой фазы на растворенных примесях [57-59]. Далее, в работах [60-67] были исследованы условия образования такой области перед плоским фронтом для нестационарной кристаллизации в автомодельных условиях. Интересным обстоятельством является то, что при изменении теплофизических параметров процесса неустойчивость может изменять свой тип [68] (переключаться с мягкого типа на жесткий).

Математическая модель процесса затвердевания бинарных соединений с двухфазной зоной, впервые была обобщена в работах [69, 70]. Она представляет собой нелинейную нестационарную систему уравнений в двухфазной зоне, твердой и жидкой фазах, которые связаны пограничными условиями на движущихся межфазных границах твердая фаза – двухфазная область и двухфазная область – жидкая фаза. Общих методов решения таких сложных задач с подвижными границами не существует и дальнейшее развитие теории было связано с разработкой приближенных методов решения таких задач. Существенное упрощение может быть достигнуто при рассмотрении процессов интенсивного роста твердой фазы в двухфазной зоне, когда выделяющаяся скрытая теплота кристаллизации компенсирует концентрационное переохлаждение. В случае затвердевания бинарных систем, в работах [71-76] были разработаны методы получения точных аналитических решений нелинейных уравнений теплопереноса для процессов кристаллизации с постоянной скоростью, которые основаны на переходе к новой независимой переменной – доле твердой фазы в области фазового перехода (в этих работах теория была также обобщена на присутствие слабой конвекции, эффектов термодиффузии и температурной зависимости коэффициента диффузии). Далее, в работах [65-67] были разработаны методы решения уравнений двухфазной зоны при кристаллизации бинарных расплавов в автомодельных условиях, которые основаны на разложении температуры, концентрации примеси и доли твердой фазы в степенные ряды. Эта теория была обобщена в работах [77-82] на решение уравнений

двухфазной зоны в сильно нестационарных условиях реализации процесса (здесь были использованы уравнение Шейла [83, 84] и некоторые дополнительные оценки параметров системы).

Довольно часто необходимо учитывать присутствие в системе третьего компонента. Основные уравнения безконвективной кристаллизации в такой системе на основе данных эксперимента [85] были развиты в работе [86]. В силу сильной нелинейности системы в [86] были получены ее аналитические решения лишь в случае отсутствия диффузии и при нулевой скрытой теплоте затвердевания. Далее в работах [87, 88] была разработана приближенная теория решения нелинейных уравнений работы [86] в автомодельных условиях в отсутствие диффузии и при линейных уравнениях ликвидуса и котектики, а в работах [89-91] были развиты методы учета диффузии [89, 90] и отклонений упомянутых зависимостей от линейных [91]. В целом, теория работ [87-91] хорошо описывает экспериментальные данные в автомодельных условиях реализации процесса. В настоящей работе предложен оригинальный метод решения математической модели работы [86], описывающей затвердевание трехкомпонентных систем в установившихся условиях, когда скорость кристаллизации, распределения температуры, концентраций примеси и долей твердых фаз в системе устанавливаются и перестают зависеть от времени. При этом дендритный рост в области фазового перехода осредняется за счет введения новой функции – доли твердой фазы, которая является усредненной характеристикой ростовых форм двухфазной зоны.

Рассмотрим процесс направленного затвердевания трехкомпонентной системы вдоль пространственной оси z (рис. 3). Через B и C обозначим концентрации двух веществ, растворенных в растворителе A ($A + B + C = 1$). Поскольку основное вещество претерпевает фазовый переход в области, не совпадающей с областью фазового перехода второго вещества, в процессе затвердевания возникает две двухфазных зоны – основная и котектическая. Обозначим их протяженности через δ_p и δ_c . Учитывая, что фазовая диаграмма рассматриваемой системы подробно обсуждалась в работах [86, 87], не будем здесь останавливаться на уравнениях ликвидуса, котектики и эвтектики. Важным обстоятельством является то, что время релаксации температурного поля $\tau_T \sim l^2/\kappa$ намного меньше характерных времен релаксации концентрационных полей $\tau_B \sim l^2/D_B$ и $\tau_C \sim l^2/D_C$, т.е. $\tau_T \ll \tau_C$ и $\tau_T \ll \tau_B$ (здесь l – характерный масштаб длины, κ – коэффициент температуропроводности, D_B и D_C – коэффициенты диффузии примеси компонент B и C). Из этой оценки времен релаксации следует, что производные от температуры по времени t

много меньше остальных слагаемых соответствующих уравнений модели. Учитывая это обстоятельство, запишем математическую модель процесса на основе результатов работы [86].



Рис. 3. Схема процесса направленной кристаллизации трехкомпонентных систем с двумя областями фазового перехода.

В жидкой фазе системы (расплаве или растворе) концентрации примесей B_∞ и C_∞ , а также температурный градиент G_L являются заданными величинами

$$B \rightarrow B_\infty, C \rightarrow C_\infty, z \rightarrow \infty, \quad (38)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = G_L, z > Vt + \delta = Vt + \delta_C + \delta_P, \quad (39)$$

где T - температура, V - постоянная скорость затвердевания. Кроме этого, в жидкой фазе выполняются уравнения диффузии примеси

$$\frac{\partial B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 B}{\partial z^2}, \frac{\partial C}{\partial t} = D_C \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, z > Vt + \delta. \quad (40)$$

Пограничные условия на межфазной границе основная двухфазная зона – расплав, имеющие физический смысл баланса тепла, массы и условий непрерывности, записываются в виде

$$L_v V[\varphi_A]_-^+ = \left[\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_-^+, [T]_-^+ = [B]_-^+ = [C]_-^+ = 0, z = Vt + \delta, \quad (41)$$

$$BV[\varphi_A]_-^+ = D_B \left[\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]_-^+, CV[\varphi_A]_-^+ = D_C \left[\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]_-^+, z = Vt + \delta, \quad (42)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^+ = m_B \left(\frac{\partial B}{\partial z} \right)^+ + m_C \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)^+, z = Vt + \delta. \quad (43)$$

Здесь L_v - скрытая теплота затвердевания, $\bar{k} = k_L \chi + k_S (1 - \chi)$, k_L и k_S - коэффициенты теплопроводности расплава и твердой фазы, χ - доля жидкой фазы, m_B и m_C - наклоны ликвидуса компонент B и C , φ_A - доля твердой фазы компонента A . Символами $[\cdot]_-^+$ и $(\cdot)^+$ соответственно обозначены скачок величины на границе и ее значение справа от границы. Отметим, что уравнение (43) имеет смысл условия маргинального равновесия [86].

В основной двухфазной зоне, где фазовый переход претерпевает компонент A ($\chi = 1 - \varphi_A$), уравнения тепломассопереноса записываются в виде

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{k} \frac{dT}{dz} \right) + L_v \frac{\partial \varphi_A}{\partial t} = 0, T \equiv T^L(B, C) = T_M + m_B B + m_C C, Vt + \delta_C < z < Vt + \delta, \quad (44)$$

$$D_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi B) = 0, D_C \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi C) = 0, Vt + \delta_C < z < Vt + \delta. \quad (45)$$

Здесь T_M обозначает температуру фазового перехода чистого вещества.

Запишем теперь граничные условия на второй межфазной поверхности между котектической и основной двухфазными зонами. Эти условия, отражающие баланс тепла и массы, непрерывность температурного поля и полей концентраций примеси, записываются в виде [86]

$$L_V V[\varphi_A + \varphi_B]_-^+ = \left[\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_-^+, [T]_-^+ = [B]_-^+ = [C]_-^+ = 0, m_B^C \left(\frac{\partial B}{\partial z} \right)_-^+ = m_C^C \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_-^+ \quad z = Vt + \delta_C, \quad (46)$$

$$V \{ B[\varphi_A]_-^+ + (B-1)[\varphi_B]_-^+ \} = D_B \left[\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]_-^+, VC[\varphi_A + \varphi_B]_-^+ = D_C \left[\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt + \delta_C. \quad (47)$$

Здесь φ_B обозначает долю твердой фазы компонента B , а m_B^C и m_C^C - котектические наклоны ликвидуса компонент B и C .

Далее, уравнения тепломассопереноса в котектической двухфазной зоне, где фазовый переход претерпевают два компонента A и B ($\chi = 1 - \varphi_A - \varphi_B$), записываются как

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + L_V \frac{\partial(\varphi_A + \varphi_B)}{\partial t} = 0, \quad Vt < z < Vt + \delta_C, \quad (48)$$

$$B \equiv B^C(T) = B_E - \frac{T - T_E}{m_B^C}, \quad C \equiv C^C(T) = -\frac{T - T_E^{AB}}{m_C^C}, \quad Vt < z < Vt + \delta_C, \quad (49)$$

$$D_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi B + \varphi_B) = 0, \quad D_C \frac{\partial}{\partial z} \left(\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi C) = 0, \quad Vt < z < Vt + \delta_C. \quad (50)$$

Здесь T_E , B_E и C_E - известные значения температуры и концентраций примеси в точке эвтектики трехкомпонентной системы, а T_E^{AB} - температура в точке эвтектики бинарной системы (см., например, работы [86, 87]).

Граничные условия на поверхности между твердой фазой и котектической зоной имеют следующий вид:

$$L_V V[\varphi_A + \varphi_B + \varphi_C]_-^+ = \left[\bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_-^+, \quad T = T_E, \quad B = B_E, \quad C = C_E, \quad z = Vt, \quad (51)$$

$$V \{ B[\varphi_A]_-^+ + (B-1)[\varphi_B]_-^+ + B[\varphi_C]_-^+ \} = D_B \left[\chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt, \quad (52)$$

$$V\{C[\varphi_A]_+^+ + C[\varphi_B]_+^+ + (C-1)[\varphi_C]_+^+\} = D_C \left[\chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]_+^+, \quad z = Vt. \quad (53)$$

В твердой фазе имеем постоянный температурный градиент G_s , т.е.

$$\frac{\partial T}{\partial z} = G_s, \quad z < Vt. \quad (54)$$

Система уравнений (38)-(54) представляет собой замкнутую систему уравнений и граничных условий для отыскания решения задачи о замерзании трехкомпонентной системы с постоянной скоростью.

Перейдем в движущуюся с постоянной скоростью V систему координат и введем безразмерные переменные и параметры

$$y = \frac{V(z - Vt)}{D_B}, \quad \varepsilon_P = \frac{V\delta_P}{D_B}, \quad \varepsilon_C = \frac{V\delta_C}{D_B}, \quad \varepsilon = \frac{V\delta}{D_B}, \quad (55)$$

$$D_{BC} = \frac{D_B}{D_C}, \quad \theta = \frac{T}{m_B B_\infty}, \quad m_{CB} = \frac{m_C}{m_B}, \quad m_{CB}^C = \frac{m_C^C}{m_B^C}.$$

В новой системе координат процесс кристаллизации является установившимся и все неизвестные функции не зависят от времени.

Уравнения диффузии (40) в переменных (55) при использовании граничных условий (38) имеют следующие интегралы:

$$B(y) = B_\infty + B_1 \exp(-y), \quad C(y) = C_\infty + C_1 \exp(-D_{BC}y), \quad y > \varepsilon = \varepsilon_C + \varepsilon_P, \quad (56)$$

где B_1 и C_1 - постоянные интегрирования. Далее, интегрируя уравнения теплопереноса (44) и (45) в основной двухфазной области, находим производные температуры и концентраций примеси

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{D_B(L_V V \varphi_A + A_1)}{m_B V B_\infty \bar{k}_P(\varphi_A)}, \quad \bar{k}_P(\varphi_A) = k_L(1 - \varphi_A) + k_S \varphi_A, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon, \quad (57)$$

$$\frac{dB}{dy} = \frac{A_2 - BV(1 - \varphi_A)}{V(1 - \varphi_A)}, \quad \frac{dC}{dy} = \frac{D_{BC}(A_3 - CV(1 - \varphi_A))}{V(1 - \varphi_A)}, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon, \quad (58)$$

где $A_1 = \bar{k}_P(\varphi_{APL}^-)G_{PL} - VL_V\varphi_{APL}^-$, A_2 и A_3 - постоянные интегрирования, G_{PL} и φ_{APL}^- - градиент температуры и доля твердой фазы при $y = \varepsilon$, определенные со стороны основной двухфазной зоны. В дальнейшем, эти неизвестные будут найдены. Комбинируя теперь выражения (57) и (58) с уравнением ликвидуса (44), находим связь между концентрациями B и C в основной двухфазной области

$$B(\varphi_A) = g(\varphi_A) - D_{BC}m_{CB}C(\varphi_A), \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon, \quad (59)$$

$$g(\varphi_A) = \frac{A_2}{V(1 - \varphi_A)} + \frac{D_{BC}m_{CB}A_3}{V(1 - \varphi_A)} - \frac{D_B(L_V V\varphi_A + A_1)}{m_B V\bar{k}_P(\varphi_A)}.$$

Теперь из уравнений (58) и (59) определяем долю твердой фазы в основной двухфазной зоне в виде обратной зависимости

$$y(\varphi_A) = \varepsilon_C + \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_A} S(\Phi_A) d\Phi_A, \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon, \quad (60)$$

$$S(\Phi_A) = \frac{g'(\Phi_A)}{g_1(\Phi_A)}, \quad g_1(\Phi_A) = \frac{D_B}{m_B V\bar{k}_P(\Phi_A)} (L_V V(\Phi_A - \Phi_{APL}^-) + \bar{k}(\Phi_{APL}^-)G_{PL}).$$

Здесь φ_{ACP}^+ обозначает долю твердой фазы справа от границы котектической – основная двухфазная зоны. Далее, из выражения (60) определяем протяженности основной двухфазной зоны ε_P и всей области фазового перехода ε

$$\varepsilon_P = \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_{APL}^-} S(\Phi_A) d\Phi_A, \quad \varepsilon = \varepsilon_C + \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_{APL}^-} S(\Phi_A) d\Phi_A. \quad (61)$$

Ради простоты изложения, рассмотрим далее случай $D_{BC} = 1$ [86]. Подставляя (60) в

(58), находим концентрацию примеси компонента C в основной зоне фазового превращения

$$C(\varphi_A) = \left[A_4 + A_3 \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_A} \frac{S(\Phi_A) \exp(y(\Phi_A) - y(\varphi_A))}{V(1 - \Phi_A)} d\Phi_A \right], \quad \varepsilon_C < y < \varepsilon. \quad (62)$$

Соотношения (59)-(62) представляют собой параметрическое решение задачи в основной двухфазной зоне. При этом, параметром является доля твердой фазы φ_A (или $\chi = 1 - \varphi_A$) затвердевающего в этой области компонента.

Подставляя решения (59)-(62) в граничные условия (41)-(43), получаем следующие выражения, определяющие неизвестные постоянные:

$$\frac{G_L D_B \exp(\varepsilon)}{V m_B} + B_1 + m_{CB} C_1 = 0, \quad (63)$$

$$G_{PL} = \frac{k_L G_L + L_V V \varphi_{APL}^-}{\bar{k}_P(\varphi_{APL}^-)}, \quad A_2 = V B_\infty, \quad A_3 = V C_\infty, \quad (64)$$

$$B_1 = [g(\varphi_{APL}^-) - B_\infty - m_{CB} C_\infty] \exp(\varepsilon) - m_{CB} C_1, \quad (65)$$

$$A_4 = [C_\infty + C_1 \exp(-\varepsilon)] \exp[\varepsilon - \varepsilon_C] - V C_\infty I_0, \quad I_0 = \int_{\varphi_{ACP}^+}^{\varphi_{APL}^-} \frac{S(\Phi_A) \exp[y(\Phi_A) - \varepsilon_C]}{V(1 - \Phi_A)} d\Phi_A. \quad (66)$$

Из соотношений (63)-(65) можно выразить долю твердой фазы компонента A слева от границы основная двухфазная область – расплав. Опуская подробности математических преобразований, приведем это выражение к виду

$$\varphi_{APL}^- \left[\frac{m_B V (B_\infty + m_{CB} C_\infty)}{1 - \varphi_{APL}^-} - \frac{D_B [L_V V - G_L (k_S - k_L)]}{k_L + (k_S - k_L) \varphi_{APL}^-} \right] = 0. \quad (67)$$

Интегрирование уравнений (48)-(50) в котектической области фазового перехода дает следующие выражения:

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{D_B(L_V V(1-\chi) + A_5)}{m_B V B_\infty \bar{k}_C(\chi)}, \quad \bar{k}_C(\chi) = k_L \chi + k_s(1-\chi), \quad 0 < y < \varepsilon_C, \quad (68)$$

$$\frac{dB}{dy} = \frac{A_6 - V(\chi B + \varphi_B)}{V\chi}, \quad \frac{dC}{dy} = \frac{A_7 - V\chi C}{V\chi}, \quad 0 < y < \varepsilon_C. \quad (69)$$

В формулах (68) и (69) $A_5 = \bar{k}_C(\chi_{SC}^+) G_{SC} - L_V V(1 - \chi_{SC}^+)$, $\chi = 1 - \varphi_A - \varphi_B$, A_6 и A_7 - постоянные интегрирования, G_{SC} и χ_{SC}^+ - температурный градиент и доля жидкой фазы справа от границы твердый материал – зона котектики. Эти константы будут определены ниже.

Далее, комбинируя выражения (49), (68) и (69), получаем распределения температуры, концентраций примеси и долей твердой фазы обеих компонент в зоне котектики

$$\theta(\chi) = \frac{T_E^{AB} - m_C^C C(\chi)}{m_B B_\infty}, \quad C(\chi) = \frac{1}{V\chi} \left(A_7 + \frac{F_0(\chi)}{m_C^C} \right), \quad 0 < y < \varepsilon_C, \quad (70)$$

$$B(\chi) = m_{CB}^C C(\chi) + B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C}, \quad 0 < y < \varepsilon_C, \quad (71)$$

$$\varphi_A(\chi) = 1 - \chi - \varphi_B(\chi), \quad \varphi_B(\chi) = \frac{F_0(\chi)}{m_B^C V} + \frac{A_6}{V} - \chi B(\chi), \quad 0 < y < \varepsilon_C. \quad (72)$$

Здесь m_{CB}^C определено в выражении (55), а

$$F_0(\chi) = \frac{D_B \chi [\bar{k}_C(\chi_{SC}^+) G_{SC} + L_V V(\chi_{SC}^+ - \chi)]}{\bar{k}_C(\chi)}.$$

Далее, учитывая, что

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{d\theta}{d\chi} \frac{d\chi}{dy},$$

Находим распределение доли твердой фазы в зоне котектики в виде обратной функции и безразмерную протяженность котектической области

$$y(\chi) = \frac{m_B V B_\infty}{D_B} \int_{\chi_{SC}^+}^{\chi} \frac{d\theta/d\chi_1}{F_0(\chi_1)} d\chi_1, \quad \varepsilon_C = \frac{m_B V B_\infty}{D_B} \int_{\chi_{SC}^+}^{\chi_{CP}^-} \frac{d\theta/d\chi_1}{F_0(\chi_1)} d\chi_1, \quad (73)$$

где χ_{CP}^- - доля жидкой фазы слева от границы между котектической и основной двухфазными зонами. Выражения (70)-(73) определяют решение задачи в котектической области фазового перехода. Эти решения имеют параметрический вид, как и решения (59)-(62) в основной двухфазной зоне. Однако, параметром здесь является доля жидкой фазы χ .

Подставляя теперь эти решения в граничные условия (51)-(53) и учитывая температурный градиент (54), получаем следующие соотношения для неизвестных постоянных:

$$G_{SC} = \frac{k_S G_S - L_V V \chi_{SC}^+}{\bar{k}_C(\chi_{SC}^+)}, \quad V(\varphi_{BSC}^- - \varphi_{BSC}^+ - B_E \chi_{SC}^+) + V(B_E \chi_{SC}^+ + \varphi_{BSC}^+) = A_6, \quad (74)$$

$$V(\varphi_{CSC}^- - \varphi_{CSC}^+ - C_E \chi_{SC}^+) + V C_E \chi_{SC}^+ = A_7, \quad A_7 = V C_E \chi_{SC}^+ - \frac{D_B \chi_{SC}^+}{m_C} G_{SC}, \quad (75)$$

где φ_{BSC}^- и φ_{BSC}^+ - значения доли твердой фазы компонента B слева и справа от границы твердая фаза – котектическая зона, а φ_{CSC}^- и φ_{CSC}^+ - аналогичные значения для компонента C .

Подстановка производных температуры из выражений (57) и (68) в первое граничное условие (46) определяет явную зависимость скорости затвердевания от температурных градиентов в твердой и жидкой фазах

$$V = \frac{k_S G_S - k_L G_L}{L_V}. \quad (76)$$

Важным обстоятельством является то, что выражение (76) совпадает со скоростью затвердевания плоского фронта и двухфазной зоны, описывающих кристаллизацию бинарных смесей.

Подставляя теперь производные концентраций примеси из выражений (58) и (69) в граничные условия (47), находим постоянные A_6 и A_7

$$A_6 = VB_\infty, A_7 = VC_\infty. \quad (77)$$

Комбинируя сейчас выражения (74), (75) и (77), получаем квадратное уравнение для отыскания доли жидкой фазы справа от границы твердая фаза – область котектики. Его решение записывается в виде

$$\chi_{SC}^+ = \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_2a_0}}{2a_2}, \quad (78)$$

$$a_0 = -Vk_S C_\infty, a_1 = VC_E k_S - V(k_L - k_S)C_\infty - \frac{D_B k_S G_S}{m_C^C}, a_2 = \frac{D_B L_V V}{m_C^C} + VC_E(k_L - k_S).$$

Выражение (78) имеет только одно решение, лежащее на единичном отрезке.

Граничные условия (47) позволяют теперь найти пограничные значения концентраций примеси B_{CP} и $C_{CP} = A_4$ на межфазной поверхности между котектической и основной областями фазового перехода

$$B_{CP} = m_{CB}^C C_{CP} + B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C} = g(\varphi_{ACP}^+) - m_{CB}^C C_{CP}, \quad (79)$$

$$C_{CP} = A_4 = \frac{1}{V\chi_{CP}^-} \left(VC_\infty + \frac{D_B \chi_{CP}^- [\bar{k}_C (\chi_{SC}^+) G_{SC} + L_V V (\chi_{SC}^+ - \chi_{CP}^-)]}{m_C^C \bar{k}_C (\chi_{CP}^-)} \right). \quad (80)$$

Подстановка B_{CP} из (79) во второе граничное условие (46) определяет явное выражение для доли твердой фазы справа от границы между двухфазными зонами

$$\varphi_{ACP}^+ = 1 - \frac{B_\infty - m_{CB}^C C_\infty}{B_*}, B_* = B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C}. \quad (81)$$

Соотношение (81) показывает, что φ_{ACP}^+ определяется лишь исходными значениями концентраций примеси B_∞ и C_∞ , а также фазовой диаграммой трехкомпонентной системы.

Используя найденные зависимости можно записать решение уравнения (67) в виде

$$\varphi_{APL}^- = 0 \text{ или } \varphi_{APL}^- = \frac{H(G_S - G_L) - (B_\infty + m_{CB}C_\infty)k_L}{H(G_S - G_L) + (B_\infty + m_{CB}C_\infty)(k_S - k_L)}, \quad H = \frac{D_B k_S}{m_B V}.$$

Поскольку второй корень не принадлежит единичному отрезку, в качестве решения необходимо принимать первый корень $\varphi_{APL}^- = 0$.

Далее, комбинируя выражения (79) и (80) находим долю жидкой фазы слева от границы между котектической и основной двухфазными зонами

$$\chi_{CP}^- = \frac{-b_1 \pm \sqrt{b_1^2 - 4b_2b_0}}{2b_2}, \quad b_0 = -\frac{m_C^C C_\infty}{D_B}, \quad (82)$$

$$b_1 = \frac{g(\varphi_{ACP}^+) - B_*}{m_{CB}^C + m_{CB}} \frac{m_C^C}{D_B} - \frac{m_C^C(k_L/k_S - 1)C_\infty}{D_B} - \frac{G_S}{V}, \quad b_2 = \frac{g(\varphi_{ACP}^+) - B_*}{m_{CB}^C + m_{CB}} \frac{m_C^C(k_L/k_S - 1)}{D_B} + \frac{L_V}{k_S}.$$

Учитывая, что выражение (82) полностью определяет константу A_4 из соотношения (80), выражение (66) теперь можно использовать для нахождения константы C_1 .

Из соотношений (74) и (75) определяем теперь доли твердой фазы двух компонент слева от границы твердая фаза – зона котектики

$$\varphi_{BSC}^- = B_\infty, \quad \varphi_{CSC}^- = C_\infty. \quad (83)$$

Граничные значения справа от этой поверхности находятся из распределений (72) в виде $\varphi_{ASC}^+ = \varphi_A(\chi_{SC}^+)$ и $\varphi_{BSC}^+ = \varphi_B(\chi_{SC}^+)$. Кроме этого, распределения (72) определяют также пограничные значения долей твердой фазы φ_{ACP}^- и φ_{BCP}^- компонент A и B слева от границы между котектической и основной двухфазными зонами как $\varphi_{ACP}^- = \varphi_A(\chi_{CP}^-)$ и $\varphi_{BCP}^- = \varphi_B(\chi_{CP}^-)$.

На рис. 4 показаны распределения долей твердой и жидкой фаз во всей области фазового перехода, состоящей из котектической и основной двухфазных зон. Доля твердого вещества φ_A компонента A , претерпевающего фазовое превращение в регионах I и II, монотонно убывает в области фазового перехода. В отличие от нее, доля твердого вещества

φ_B компонента B , который претерпевает фазовое превращение лишь в регионе I, убывает только в котектической двухфазной зоне. При этом, протяженность котектической области I меньше основной области II фазового перехода. В соответствии с этими зависимостями, доля жидкой фазы χ монотонно возрастает во всей области фазового превращения (регионы I и II). При этом, в регионе I она определяется долями твердого φ_A и φ_B , а в регионе II – лишь долей φ_A . По этой причине распределение $\chi(x)$ также имеет точку перегиба в основной двухфазной зоне, как и функция $\varphi_A(x)$. Проведенные расчеты показывают, что доли твердой и жидкой фазы на границах между регионами I и II, а также II и III являются непрерывными (они разрывны лишь на границе твердая фаза – зона котектики).

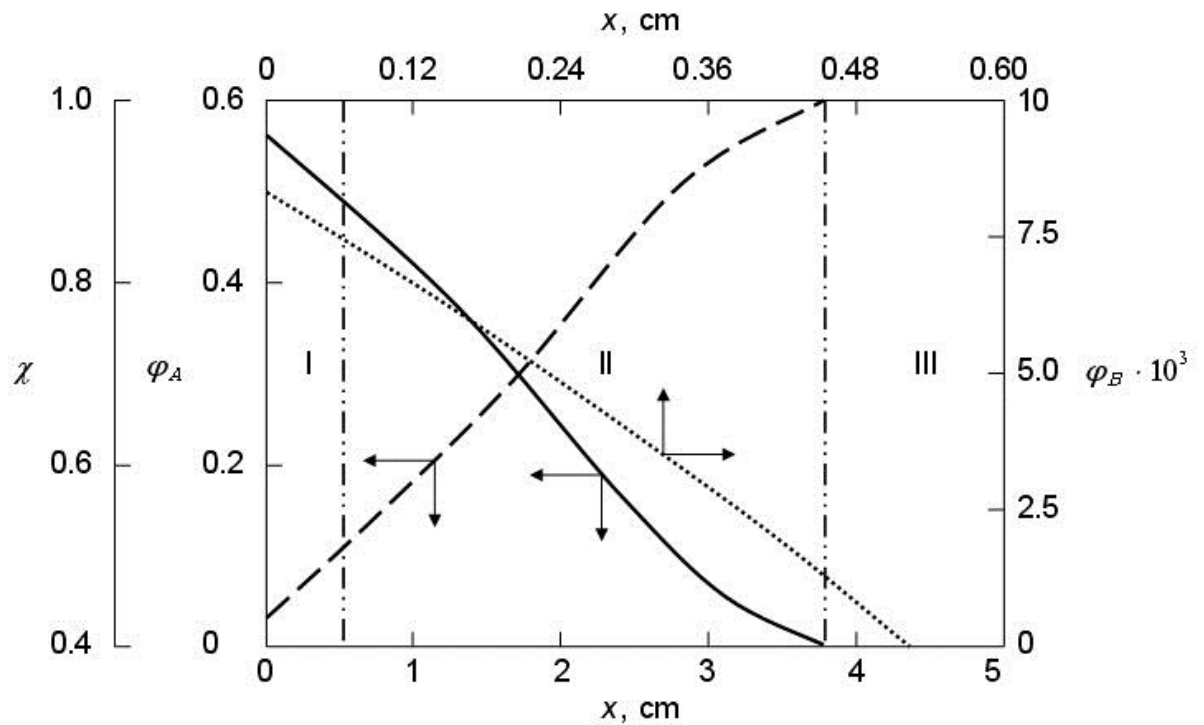


Рис. 4. Доли твердой фазы φ_A (сплошная линия) и φ_B (точечная линия), доля жидкой фазы χ (пунктирная линия) в зависимости от пространственной координаты $x = z - Vt$. Котектическая зона, основная зона и жидкая фаза соответственно расположены в регионах I, II и III (регионы изображены для нижней оси x вертикальными линиями). Теплофизические параметры расчетной системы приведены в таблице 1.

B_E	0.06
C_E	0.37
B_E^{AB}	0.10
B_∞	0.035
C_∞	0.152
T_E (°C)	–19
T_E^{AB} (°C)	–5
T_M (°C)	0
κ (см ² с ^{–1})	$1.1 \cdot 10^{-3}$
D_B (см ² с ^{–1})	$4.89 \cdot 10^{-6}$
L_V/k_S (с °C см ^{–2})	$1.52 \cdot 10^5$
k_L/k_S	0.25
G_S (°C см ^{–1})	5
G_L (°C см ^{–1})	0.5

Таблица 1. Расчетные параметры солевого раствора трехкомпонентной системы $H_2O - KNO_3 - NaNO_3$ по данным работ [85] и [86] (B и C соответствуют $NaNO_3$ и KNO_3 на основе обозначений работы [86]).

На рис. 5 изображены распределения концентраций примеси во всей области фазового перехода. Основной примесный компонент, имеющий концентрацию $C(x)$, монотонно убывает в регионах I и II вследствие вытеснения примеси растущей твердой фазой системы. В отличие от этой зависимости, имеющей традиционное поведение, концентрация примеси второго компонента $B(x)$ возрастает в зоне котектики, пересекает границу между регионами I и II, достигает максимума в основной двухфазной зоне, а затем убывает в этой зоне и в жидкой фазе стремясь к исходной концентрации B_∞ . Такое, на первый взгляд необычное поведение концентрации примеси $B(x)$, объясняется тем, что компонент B претерпевает фазовый переход в регионе I (а это приводит к уменьшению концентрации вблизи границы твердая фаза – область котектики). Отметим, что аналогичное поведение концентрации примеси $B(x)$ было получено при анализе нестационарной автомодельной кристаллизации в

работах [87-91], а также в экспериментах [85]. Однако, в этих работах точка максимума была найдена на границе регионов I и II. Причиной смещения максимума в регион II, является то обстоятельство, что в работах [87-91] были использованы приближенные уравнения диффузии примеси Шейла [83, 84] (уравнения без диффузионных слагаемых). Поэтому смещение максимума в глубь основной двухфазной зоны объясняется влиянием диффузионного транспорта примеси $B(x)$ в реальной трехкомпонентной системе.

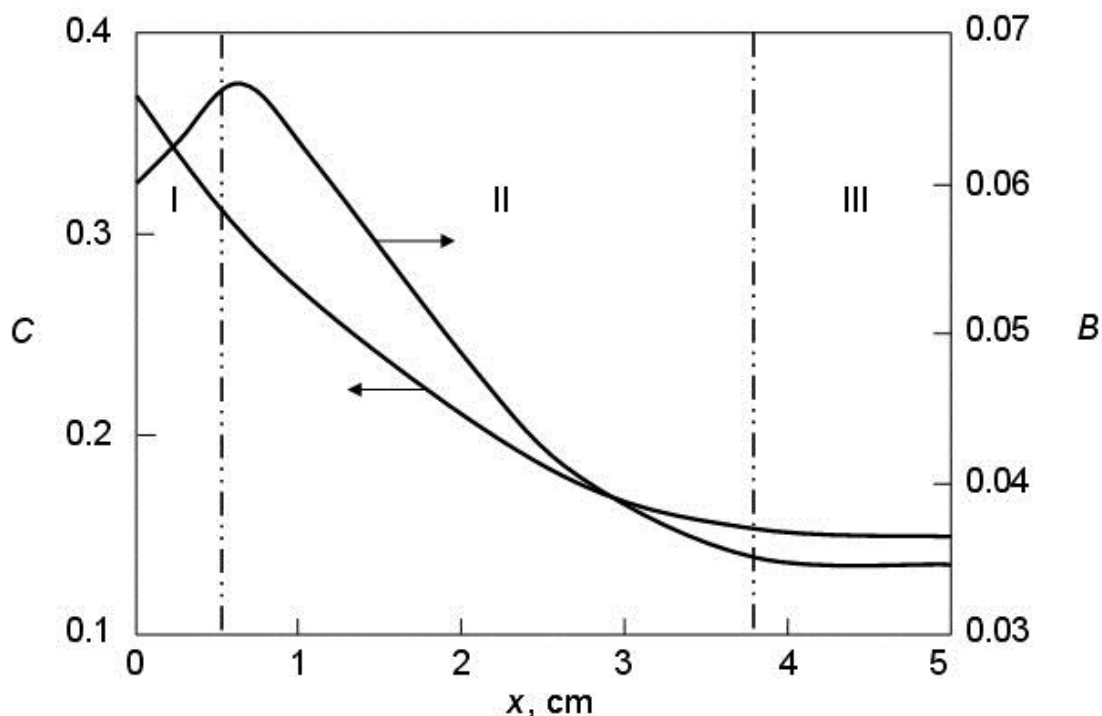


Рис. 5. Концентрации примеси C и B в зависимости от пространственной координаты $x = z - Vt$. Обозначения и расчетные параметры соответствуют рис. 4, $\delta_C = 0.53$ см, $\delta = 3.79$ см.

Рассмотренная в настоящей работе теория, описывающая рост кристалла из расплава с постоянной скоростью кристаллизации, также описывает и процессы медленного (а потому, практически стационарного) замерзания толстого пакового льда. Кроме этого, найденные в настоящей работе аналитические решения позволяют исследовать динамическую устойчивость затвердевания трехкомпонентных систем (которая ответственна за слоистое распределение примеси) по аналогии с теорией устойчивости, развитой в работах [92-95] для бинарных расплавов.

Дендритный рост в области фазового перехода с учетом турбулентных течений

Систематическое изучение фазовых превращений в системах жидкость - твердая фаза берет начало с конца XIX века с классических работ Стефана. В своих исследованиях Стефан использовал модель процесса, учитывающую перенос тепла и движение плоской границы раздела фаз - фронта кристаллизации. Предположение о существовании в системе четко выраженной границы фазового перехода, как уже отмечалось, выполняется далеко не всегда. Так, накопление примеси перед фронтом затвердевания, связанное с ее вытеснением при росте твердой фазы, приводит к возникновению перед границей жидкость - твердая фаза концентрационного переохлаждения. Описание процесса затвердевания в последующие моменты времени с помощью фронтальной модели уже не применимо, поскольку появление переохлаждения создает преимущественные условия для роста выступов твердой фазы в глубь расплава и развития неустойчивости. Таким образом, перед фронтом появляется область смешанного фазового состояния, в которой претерпевают рост элементы твердого вещества. Если это происходит достаточно интенсивно, то концентрационное переохлаждение может быть практически полностью скомпенсировано выделяющейся скрытой теплотой фазового превращения. Такая двухфазная зона получила название квазиравновесной. Далее, процесс затвердевания протекает при наличии протяженной области фазового перехода, имеющей две подвижные границы.

Экспериментально было замечено (см., например, работы [96, 97]), что при достижении двухфазной зоной некоторой критической толщины h_c концентрация примеси в жидкой части системы существенно возрастает. Это обеспечивается притоком примеси из каналов, образующихся в двухфазной зоне (под каналами понимаются свободные от твердой фазы протоки в двухфазной зоне, заполненные жидкостью). Такие каналы наблюдаются в процессах затвердевания, вызванных охлаждением системы сверху или снизу. Так, например, в первом случае, при накоплении примеси в жидкой фазе области фазового превращения увеличивается плотность жидкости, что приводит к возникновению конвективного течения в сторону располагающегося ниже раствора или расплава [98]. При этом, чем ниже температура на границе охлаждения, тем толще слой h_c и больше примеси выбрасывается конвективными струями в жидкость из каналов двухфазной зоны. Вытесненная таким образом масса замещается потоком жидкости, идущим в двухфазную область из раствора или расплава. Эта жидкость, протекая по двухфазной зоне, частично замерзает, уменьшая проницаемость зоны, и выделяет дополнительную скрытую теплоту, замедляющую скорость кристаллизации. Указанный механизм приводит к возникновению замкнутых линий тока,

характеризующих конвективные течения жидкости в каналах [98, 99]. В качестве причины образования каналов можно назвать неустойчивость однородного роста и локальную анизотропию области фазового превращения. В работе [99] предложена простейшая модель, демонстрирующая механизм возникновения такой неустойчивости, без учета распределения доли твердой фазы и диффузионных процессов, которые являются главной причиной образования самой двухфазной зоны. Ниже показано, что учет конвективно-диффузионных процессов, сопровождающих фазовый переход, приводит к значительному (в разы) увеличению области параметров системы, отвечающей неустойчивому режиму.

Специально отметим, что согласно экспериментальным данным количество возникающих в двухфазной зоне каналов может быть от одного канала на весь слиток [96] до целой сети каналов, отстоящих друг от друга на расстоянии порядка 1 см [98]. Образование указанных каналов (см., например, фотографии в работах [96-99]) конвективного течения жидкости является весьма распространенным явлением. Так, при затвердевании сплавов их присутствие приводит к неоднородностям примесного распределения [100], при замерзании льда они замедляют скорость его прироста [97], при кристаллизации магмы они влияют на отложения минералов [101]. Возможно, что они также встречаются на границе внутреннего и внешнего ядра Земли [102].

Течение жидкости в каналах двухфазной зоны будем описывать с помощью уравнения Дарси, для пористой среды

$$\mu u = \Pi(\rho_l g - \nabla p), \quad (84)$$

где u - скорость жидкости, p - давление, μ - коэффициент динамической вязкости, ρ_l - плотность жидкости, g - ускорение свободного падения, $\Pi = \Pi(\varphi)$ - тензор проницаемости двухфазной зоны, зависящий от доли твердой фазы φ . Проницаемости в горизонтальном (Π_h) и вертикальном (Π_v) направлениях связаны с помощью коэффициента анизотропии $0 \leq \beta \leq 1$: $\Pi_h = \beta^2 \Pi_v$ [100]. Изменение проницаемости с глубиной двухфазного слоя связано с наличием температурного градиента. Следуя работе [99], будем моделировать такую зависимость следующим образом

$$\Pi_v(z) = \Pi_v(0) \exp(\gamma z), \quad \Pi_h(z) = \beta^2 \Pi_v(z), \quad (85)$$

где γ - параметр неоднородности.

Процессы тепло- и массопереноса в двухфазной зоне будем описывать с помощью конвективных уравнений теплопроводности, диффузии и уравнения ликвидус, следующего из фазовой диаграммы

$$\rho_m c_m \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_l c_l u \nabla T = \nabla(k_m \nabla T) + \rho_s L \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (86)$$

$$(1-\varphi) \frac{\partial C}{\partial t} + u \nabla C = \nabla(D_m \nabla C) + (1-k)C \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (87)$$

$$T = T_* - mC, \quad (88)$$

где T - температура, C - концентрация примеси, L - скрытая теплота кристаллизации, k - коэффициент распределения примеси, m - коэффициент наклона линии ликвидус, T_* - температура фазового перехода чистого вещества, ρ_s - плотность твердой фазы, ρ_m , c_m , k_m и D_m - плотность, теплоемкость, теплопроводность и коэффициент диффузии примеси, зависящие от доли твердой фазы φ . Коэффициенты переноса в двухфазной зоне определяются через коэффициенты переноса в твердой и жидкой фазах согласно правилу смесей

$$\rho_m c_m = \rho_l c_l (1-\varphi) + \rho_s c_s \varphi, \quad k_m = k_l (1-\varphi) + k_s \varphi, \quad D_m = D_l (1-\varphi), \quad (89)$$

где индексы s и l обозначают соответствующие величины, определенные для твердого и жидкого состояния.

На границе области фазового перехода и жидкости выполняются условия баланса тепла и массы, которые имеют вид

$$\rho_s L \varphi_b V = k_m(\varphi_b) \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^-} - k_l \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^+}, \quad (1-k)C_b \varphi_b V = D_m(\varphi_b) \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{b^-} - D_l \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{b^+}, \quad (90)$$

в случае ламинарного потока жидкости в океане и

$$\rho_s L \varphi_b V = k_m(\varphi_b) \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^-} - \alpha_h \rho_l c_l u_* (T_\infty - T_b), \quad (91)$$

$$(1-k)C_b \varphi_b V = D_m(\varphi_b) \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{b^-} - \alpha_s u_* (C_\infty - C_b),$$

В случае турбулентного потока. Здесь ρ_l и c_l - плотность и теплоемкость жидкости, u_* - скорость трения, V - скорость движения межфазной границы, α_h и α_s - коэффициенты турбулентного переноса тепла и массы, а индекс b обозначает соответствующую величину на границе.

Течение жидкости со скоростью U (рис. 6) возмущает межфазную границу из положения $z=0$, соответствующего равновесию, в некоторое новое положение $z = \zeta(x, t) = \hat{\zeta} \exp(i\alpha x + \sigma t)$. Здесь $\hat{\zeta}$ - амплитуда возмущений, α и σ - волновое число и параметр скорости роста возмущений (параметр неустойчивости), i - мнимая единица. Будем считать, что движение жидкости безвихревое, тогда потенциал скорости удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta\Phi = 0$ ($u = \nabla\Phi$). Далее, пренебрегая скоростью течения жидкости в двухфазной зоне по сравнению со скоростью течения жидкости в области $z > 0$, на межфазной границе имеем пограничное условие непротекания жидкости. С учетом этого, потенциал скорости в жидкости принимает вид

$$\Phi = Ux - iU\zeta \exp(-\alpha z). \quad (92)$$

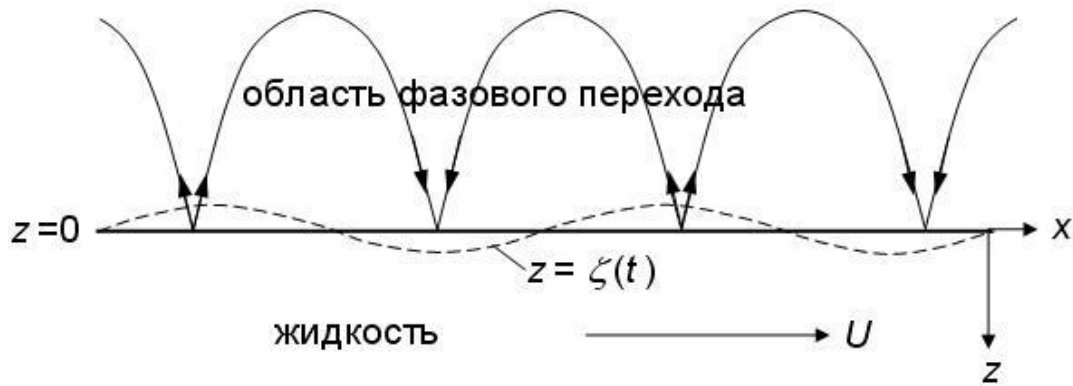


Рис. 6. Схематическая диаграмма процесса. Течение в каналах области фазового перехода изображено стрелками.

Давление на межфазной границе, определяющее течения в каналах двухфазной области, находится из уравнения Бернулли с помощью (9) и имеет вид

$$p = -\rho_l \alpha U^2 \zeta. \quad (93)$$

Далее, принимая во внимание уравнение неразрывности $\nabla u = 0$ для потока жидкости в каналах (здесь мы считаем малыми изменения доли твердой фазы в двухфазной зоне, вследствие активной циркуляции жидкости в области, занимаемой каналами), из уравнений (84) и (85) получаем уравнение для определения давления в зоне фазового перехода

$$\beta^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \gamma \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0,$$

решение которого имеет вид:

$$p = -\rho_l \alpha U^2 \zeta \exp(qz), \quad q = \frac{\gamma}{2} + \frac{\sqrt{\gamma^2 + 4\alpha^2 \beta^2}}{2}. \quad (94)$$

Отметим, что на поверхности $z = 0$ выражение (94) переходит в (93). Для простоты изложения здесь мы пренебрегаем действием силы тяжести и охватываем ситуации охлаждения сверху и снизу.

Поскольку время релаксации температурного поля намного меньше всех остальных характерных времен процесса, температуру в зоне фазового превращения можно считать линейной функцией пространственной координаты z : $T(x, z, t) = T_b + Gz + \hat{\theta}(z) \exp(i\alpha x + \sigma t)$ (при этом, концентрация примеси определяется уравнением (5)), где T_b - температура на межфазной границе, G - температурный градиент. Амплитуда возмущений температуры $\hat{\theta}$ находится из системы уравнений (86)-(88) с учетом выражения (94), зависимостей коэффициентов переноса от доли твердой фазы φ (выражения (89)) и ее возмущений $\varphi(x, z, t) = \varphi_0(x, z) + \Phi(z) \exp(i\alpha x + \sigma t)$. Здесь φ_0 и Φ - невозмущенное значение и амплитуда возмущений доли твердой фазы. Принимая во внимание квазистационарное приближение ($\partial/\partial t \rightarrow 0$; его применимость показана в работе [103]) и исключая из системы (3)-(5) группу

слагаемых, содержащих φ_0 , получаем следующее уравнение

$$\frac{d^2 \hat{\theta}}{dz^2} - \alpha^2 \hat{\theta}(z) = A \exp(\gamma + q)z, \quad A = \left(1 + \frac{\kappa(K-1)}{KD_l}\right) \frac{\Pi_v(0)\alpha U^2 q G \hat{\zeta}}{\kappa \nu}, \quad (95)$$

где $\kappa = k_s/(\rho_l c_l)$, $K = k_s/k_l$, $\nu = \mu/\rho_l$ - кинематическая вязкость.

Далее, учитывая ограниченность $\hat{\theta}$ при $z \rightarrow -\infty$ и граничное условие $\hat{\theta}(0) = -G\hat{\zeta}$, следующее из температурного распределения, находим решение уравнения (95) при $\beta \neq 1$ и $\gamma \neq 0$

$$\hat{\theta}(z) = -G\hat{\zeta} \exp(\alpha z) + \frac{A}{(q+\gamma)^2 - \alpha^2} [\exp((q+\gamma)z) - \exp(\alpha z)] \quad (96)$$

В случае изотропной ($\beta=1$) и однородной ($\gamma=0$) структуры области фазового перехода решение записывается в виде

$$\hat{\theta}(z) = -G\hat{\zeta} \exp(\alpha z) + \frac{A}{2\alpha} z \exp(\alpha z). \quad (97)$$

Исключая из граничных условий (90) долю φ_b с использованием выражений (88) и (89), на межфазной границе в нетурбулентном случае имеем следующее условие

$$\rho_s L V = k_s \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^-} + \frac{(1-k)k_l(T_b - T_*)V}{D_l}. \quad (98)$$

При выводе этого соотношения было использовано условие маргинального равновесия на межфазной границе со стороны жидкости

$$\left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{b^+} = -\frac{1}{m} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^+}.$$

По аналогии, исключая из граничных условий (91) долю φ_b , в турбулентном случае имеем следующее условие на межфазной границе

$$\left[\rho_s LV - (k_s - k_l) \frac{\partial T_m}{\partial z} \right] \left[D_l \frac{\partial T_m}{\partial z} + \alpha_s u_* (mC_\infty - T_* + T_b) \right] = \quad (99)$$

$$= \left[k_l \frac{\partial T_m}{\partial z} - \alpha_h \rho_l c_l u_* (T_\infty - T_b) \right] \left[D_l \frac{\partial T_m}{\partial z} - (1 - k_0)(T_* - T_b)V \right].$$

Далее, возмущая выражения (98) и (99) в окрестности положения равновесия $z = 0$, подставляя соотношения (96) и (97), находим параметр эволюции возмущений

$$\sigma = \alpha V_1 \left(\frac{A_*}{q + \gamma + \alpha} - 1 \right) - \frac{(1 - k_0)V_1^2}{KD_l}, \quad \beta \neq 1, \gamma \neq 0, \quad (100)$$

$$\sigma = \alpha V_1 \left(\frac{A_*}{2\alpha} - 1 \right) - \frac{(1 - k_0)V_1^2}{KD_l}, \quad \beta = 1, \gamma = 0,$$

$$A_* = \frac{A}{\alpha G \hat{\zeta}}, \quad V_1 = \frac{k_s G D_l}{\rho_s L D_l - (1 - k_0)k_l(T_b - T_*)}.$$

в нетурбулентном случае и

$$\sigma = \frac{P(D_l a_1 + k_l a_2 - D_l a_3 + a_4) - G(a_1(1 - k_0)V_2 + a_2 \rho_l c_l \alpha_h u_* - a_3 \alpha_s u_*)}{a_5}, \quad P = \frac{d\hat{\theta}/dz}{\hat{\zeta}}, \quad (101)$$

$$V_2 = G \frac{a_1 D_l + a_4}{a_5}, \quad a_1 = k_l G - \rho_l c_l \alpha_h u_* (T_\infty - T_b), \quad a_2 = D_l G - (T_* - T_b)(1 - k_0)V_2,$$

$$a_3 = \rho_s L V_2 - (k_s - k_l)G, \quad a_4 = (k_s - k_l)[D_l G + \alpha_s u_* (mC_\infty - T_* + T_b)],$$

$$a_5 = \frac{\rho_s L a_4}{k_s - k_l} + (T_* - T_b)(1 - k_0)a_1$$

в турбулентном случае.

Знак параметра σ определяет области устойчивости ($\sigma < 0$) и неустойчивости ($\sigma > 0$) процесса. На рис. 7-9 изображены кривые нейтральной устойчивости ($\sigma = 0$) при различных значениях параметров анизотропии и неоднородности. Для сравнения на рисунках построены соответствующие зависимости по данным теории, развитой в работе [99], где была рассмотрена упрощенная модель без учета влияния примеси, без учета зависимости коэффициентов переноса от доли твердой фазы и без учета ее возмущений (предельный переход $D_l \rightarrow \infty$ в нетурбулентной модели дает критерий неустойчивости работы [99]).

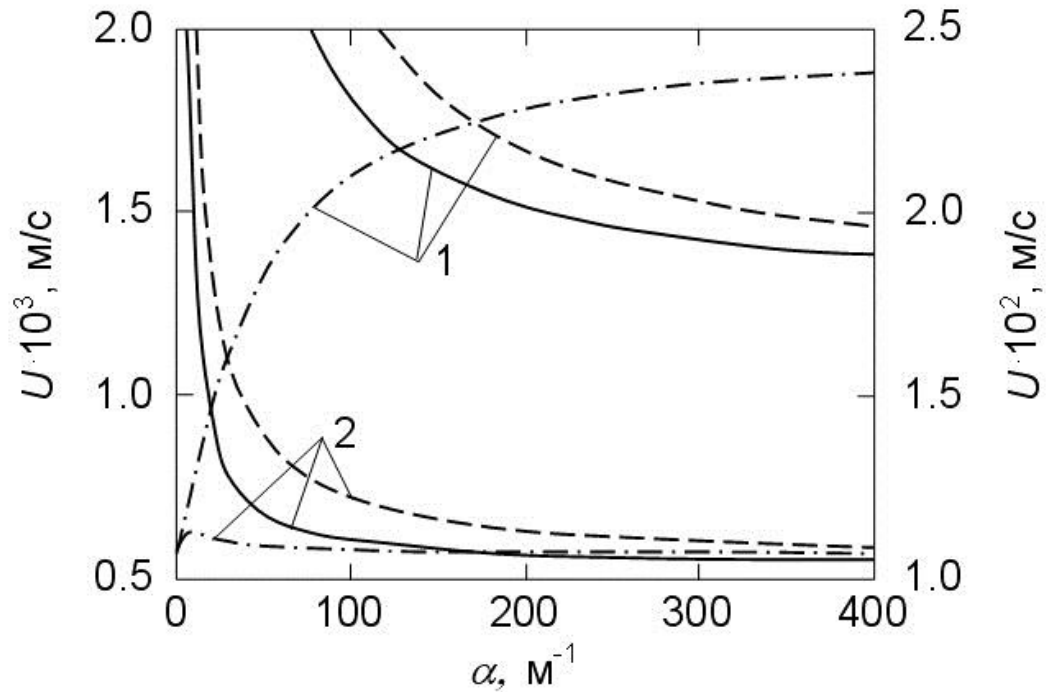


Рис. 7. Кривые нейтральной устойчивости ($\sigma = 0$), рассчитанные для ламинарной (сплошные линии, шкала значений слева) и турбулентной (пунктирные линии, шкала значений слева) моделей течения жидкости в океане. Пунктирные линии с точками обозначают приближенную теорию, развитую в работе [99] (шкала значений справа); $\beta = 0.1$ - (1) и $\beta = 1$ - (2), $\gamma = 10 \text{ м}^{-1}$. Расчетные параметры морской воды: $D_l = 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, $\nu = 1.07 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $\Pi = 10^{-8} \text{ м}^2$, $k_s = 2.22 \text{ Дж}/(\text{м} \cdot \text{с} \cdot ^\circ\text{C})$, $k_l = 0.59 \text{ Дж}/(\text{м} \cdot \text{с} \cdot ^\circ\text{C})$, $\rho_l = 10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$, $\rho_s = 920 \text{ кг}/\text{м}^3$, $c_l = 4.187 \cdot 10^3 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot ^\circ\text{C})$, $G = 50 \text{ }^\circ\text{C}/\text{м}$, $m = 5.3 \cdot 10^{-2} \text{ }^\circ\text{C}/\text{psu}$, $L = 3.35 \cdot 10^5 \text{ Дж}/\text{кг}$, $u_* = 5 \cdot 10^{-4} \text{ м}/\text{с}$, $\alpha_h = 0.0095$, $\alpha_s = \alpha_h/35$, $T_\infty = 1 \text{ }^\circ\text{C}$, $S_\infty = 35 \text{ psu}$, $T_b = -2 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_* = 0 \text{ }^\circ\text{C}$, $k_0 = 0$. Области конвективной неустойчивости и устойчивости соответственно лежат выше и ниже каждой кривой.

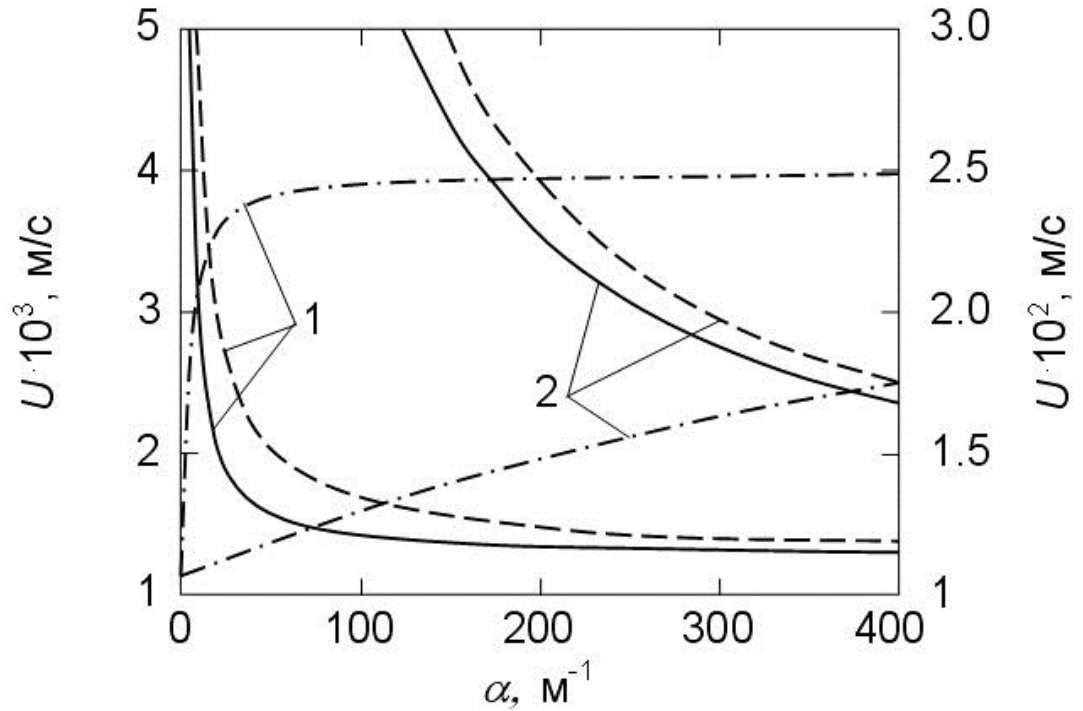


Рис. 8. Кривые нейтральной устойчивости ($\sigma = 0$), рассчитанные для ламинарной (сплошные линии, шкала значений слева) и турбулентной (пунктирные линии, шкала значений слева) моделей течения жидкости в океане. Пунктирные линии с точками обозначают приближенную теорию, развитую в работе [99] (шкала значений справа); $\gamma = 1 \text{ м}^{-1}$ - (1) и $\gamma = 100 \text{ м}^{-1}$ - (2), $\beta = 0.1$. Области конвективной неустойчивости и устойчивости соответственно лежат выше и ниже каждой кривой.

Построенные графики показывают, что учет этих факторов существенно расширяет области неустойчивости. Это, в частности, объясняется тем, что вытесняемая твердой фазой примесь повышает концентрацию и понижает температуру фазового перехода отдельных участков жидкости, а это приводит к увеличению неоднородности структурно-фазового состава. При этом, уменьшение параметра анизотропии расширяет область устойчивости вследствие ослабления конвективного переноса в области фазового превращения, а увеличение параметра неоднородности расширяет область неустойчивости вследствие интенсификации процессов тепло- и массопереноса в этой области. Выражение (100) позволяет оценить скорость роста неровностей (шероховатостей) межфазной границы, приводящей к турбулизации жидкости в слое, прилегающем к поверхности $z = 0$. Оценивая

параметр σ по порядку величины как $(10^{-5} - 10^{-4}) \text{ с}^{-1}$, находим, что амплитуда неровности в 1 см может возрасти в разы за несколько часов. Для определения размеров структур возникающих неоднородностей необходим расчет амплитуд возмущений, который может быть проведен с помощью нелинейного анализа неустойчивости.

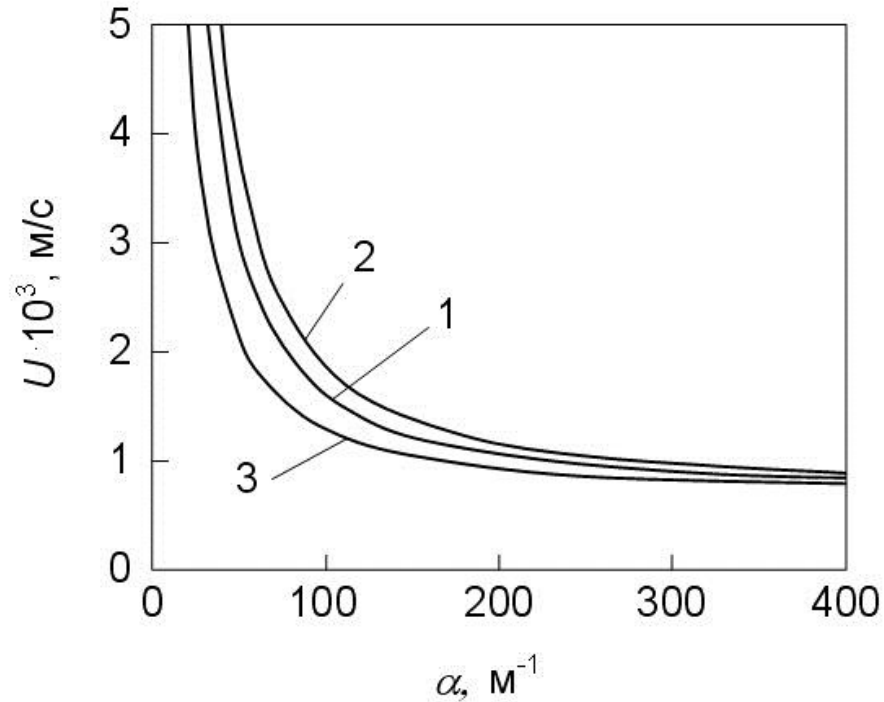


Рис. 9. Кривые нейтральной устойчивости ($\sigma = 0$), рассчитанные для турбулентных условий: $u_* = 5 \cdot 10^{-4} \text{ м/с}$, $\alpha_h = 0.0095$ - (1), $u_* = 10^{-3} \text{ м/с}$, $\alpha_h = 0.0095$ - (2), $u_* = 5 \cdot 10^{-4} \text{ м/с}$, $\alpha_h = 0.0035$ - (3). Области конвективной неустойчивости и устойчивости соответственно лежат выше и ниже каждой кривой ($\beta = 0.5$, $\gamma = 100 \text{ м}^{-1}$).

Отметим несколько важных особенностей, следующих из анализа рис. 7-9. Как легко заметить, область устойчивости является более широкой в турбулентной модели, чем в ламинарной при каждом фиксированном значении скорости жидкости U . Такое же поведение возникает при увеличении скорости трения и коэффициента турбулентного переноса тепла. Это вызвано тем обстоятельством, что турбулентные граничные условия (91) или (99) содержат в себе силы трения на межфазной границе двухфазная область – океан, которые играют роль стабилизирующего фактора.

Также отметим, что критерии неустойчивости (100) и (101) определяют различные

режимы кристаллизации с областью фазового перехода при наличии либо отсутствии в ней каналов, которые ответственны за формирование неровностей ледяного покрытия на границе раздела двухфазной зоны и океана. Указанные неровности, в свою очередь, могут сильно изменять тепловой поток, исходящий от океана в атмосферу.

2. Математическая модель кристаллизации воды в трещинах льдов с учетом процессов образования и роста ложного дна. Теоретическое решение разработанной модели

Настоящая задача будет развита на 2 этапа: кристаллизация в трещинах льда сверху под действием охлаждения со стороны атмосферы и кристаллизация льда снизу, вызванная просачиванием талой воды через лед под его основание при нагреве поверхности льда с образованием ложного дна.

Кристаллизация в трещинах льда сверху

Напряжения, возникающие во льдах Арктики и Антарктики, приводят к появлению трещин, заполненных морской водой, которые существенным образом изменяют картину теплообмена между изотермическим океаном и атмосферой. Тепловой поток от океана в атмосферу через быстро замерзающие трещины в течение зимы может быть во много раз больше, чем через толстый 3-х - 4-х метровый слой льда, который их окружает [104] (для доминирования теплового потока через трещины достаточным условием является их однопроцентное покрытие всей площади ледяного массива). Когда один процент океана покрыт трещинами, объем образующегося в них льда в течение зимы эквивалентен объему льда, образующемуся в остальной части вековых льдов Арктики. Модельные расчеты работ [105, 106] подтверждают сказанное и показывают, что роль молодого тонкого льда на тепловой баланс является наиболее ярко выраженной в апреле месяце.

Математическое моделирование проблем такого типа основано на нелинейных термодиффузионных моделях (типа модели Стефана) с подвижными границами фазового перехода. Нестационарность и нелинейность уравнений тепло- и массопереноса, граничных условий к ним и априори неизвестные законы движения границ фазового перехода очень сильно затрудняют получение решения, тем более, если речь идет об аналитическом представлении результатов. Явное решение проблемы, как правило, удастся получить, если существует определенное соотношение между пространственной и временной координатами процесса (так, например, квазистационарный режим кристаллизации с двухфазной зоной

аналитически описан в работах [72, 73]). В общем случае, при описании существенно нестационарных процессов, когда такого соотношения заранее неизвестно, обычно пользуются феноменологическими подходами (см., например, [107, 108]), описывающими лишь основные черты явления. Поэтому изучение процесса формирования молодого льда в трещинах представляет собой важную задачу как с практической, так и с теоретической точек зрения.

В настоящем исследовании предложено математическое описание результатов наблюдений (см. [109, 110]) по кристаллизации морской воды в трещинах льдов при сильных изменениях атмосферной температуры и при наличии ложного дна. В отличие от работы [110], где сделана попытка математического описания данного эксперимента на основе феноменологических балансовых соотношений и полиномиальной аппроксимации экспериментальных данных, данное исследование основано на термодиффузионной модели двухфазной зоны и ряде обоснованных гипотез, позволяющих получить явное аналитическое решение нестационарной и нелинейной проблемы кристаллизации морской воды в трещинах льда и обеспечивающих новизну данной работы.

Приведем здесь краткое описание наблюдений, проводившихся в апреле 1992 года, отражающее лишь их основную суть. В ходе наблюдений буй, имеющий почти метровую длину, погружался в морскую воду в только что образовавшейся трещине во льду и с помощью термисторов измерял температурное поле на различной глубине и толщину льда в различные моменты времени. Результаты наблюдений и их детальное обсуждение можно найти в работах [109] и [110].

Процесс кристаллизации может быть описан на основе различных предположений и гипотез. Продемонстрируем сначала один из вариантов классической модели плоского фронта: лед и морская вода разделены плоской границей фазового перехода - фронтом кристаллизации $h(t)$, движущимся вглубь океана за счет атмосферного охлаждения границы $z = 0$. Изменения атмосферной температуры со временем - функцию $T_a(t)$, определенную при $z = 0$, будем считать известной из работы [109]. Будем описывать процесс кристаллизации в рамках фронтальной модели Стефана, полностью игнорируя диффузионные процессы. Анализ наблюдений показывает, что температурный профиль в твердой фазе $T_l(z, t)$ в каждый момент времени может приближенно считаться линейной функцией пространственной координаты z (аналогичное предположение было сделано авторами работы [110]). С физической точки зрения это означает, что температуры на различных глубинах претерпевают почти самоподобное изменение с небольшими

отклонениями от «чистого» самоподобия, которые характеризуются изменением глубины z . С точки зрения математического моделирования это означает, что в уравнении теплопроводности во льду (при $0 < z < h(t)$) можно опустить производную температуры по времени, вследствие очень быстрой релаксации температурного поля по сравнению с временем движения фронта $h(t)$ кристаллизации.

Из вышесказанного следует, что температура в твердой фазе может быть представлена в виде:

$$T_i(z, t) = T_a(t) + a_1(t)z, \quad 0 < z < h(t), \quad (102)$$

где функции $a_1(t)$ и $h(t)$ определяются из граничных условий. Будем считать, что океан представляет собой почти изотермическую среду ([109]) с температурой T_p , остающейся постоянной на всех временах процесса при $z \geq h(t)$. Это означает, что $T_i(h(t), t) = T_p$ на фронте кристаллизации. Подставляя это условие в соотношение (102), получаем распределение температуры льда в виде:

$$T_i(z, t) = T_a(t) + \frac{T_p - T_a(t)}{h(t)}z. \quad (103)$$

Положение $h(t)$ фронта кристаллизации определяем из условия баланса тепла

$$k_i \frac{\partial T_i}{\partial z} = L_v \frac{dh}{dt}, \quad z = h(t),$$

где k_i и L_v соответственно представляют собой коэффициенты теплопроводности льда и скрытой теплоты кристаллизации. Подстановка распределения температуры согласно соотношению (103) в это граничное условие дает дифференциальное уравнение для отыскания функции $h(t)$. Решая это уравнение, имеем

$$h(t) = \sqrt{\frac{2k_i}{L_v} \left(T_p t - \int_0^t T_a(\alpha) d\alpha \right)}. \quad (104)$$

Здесь учтено, что $h(0) = 0$. Таким образом, выражения (103) и (104) полностью определяют решение фронтальной модели о кристаллизации морского льда.

Необходимо отметить, что полученные фронтальные зависимости далеки от наблюдаемых. Это вызвано тем обстоятельством, что в реальных системах лед замерзает при наличии протяженной области фазового перехода (двухфазной зоны), которая часто называется ледяной шугой. Далее, если предположить, что температура T_p не является величиной постоянной и зависит от времени на фронте кристаллизации при $z = h(t)$, т.е. если относиться к ней как к параметру, можно отметить следующее. При увеличении модуля T_p значения функции $h(t)$ при каждом фиксированном t уменьшаются, т.е. положение фронта удаляется от наблюдаемой зависимости, а функция $T_i(z, t)$ при каждом фиксированном значении z слегка приближается к наблюдаемому профилю. Уменьшение модуля T_p приводит к противоположным результатам. Из сказанного следует, что изменения температуры на фронте кристаллизации не могут согласовать теорию и наблюдения или, другими словами, фронтальная теория адекватно не описывает данные наблюдений. Это может быть вызвано тем обстоятельством, что в реальных системах не существует четко выделенной границы фазового перехода, как во фронтальной модели, а существует область, внутри которой вода превращается в лед. Такая область фазового перехода описывается так называемой моделью двухфазной зоны. В этой модели границы зоны определяются таким образом, чтобы по внешние стороны от них находились только чисто твердая (лед) и чисто жидкая (морская вода) фазы (рис. 10).

Будем описывать рассматриваемый процесс кристаллизации на основе модели квазиравновесной двухфазной зоны концентрационного переохлаждения.

Как и ранее, основываясь на данных наблюдений работы [109], температурный профиль во льду в каждый момент времени будем предполагать линейной функцией пространственной координаты

$$T_i(z, t) = T_a(t) + C_1(t)z, \quad 0 < z < a(t), \quad (105)$$

где $C_1(t)$ - некая функция времени. Температурный профиль в двухфазной зоне, основываясь на тех же данных, также будем полагать линейной функцией координаты z , т.е. будем считать

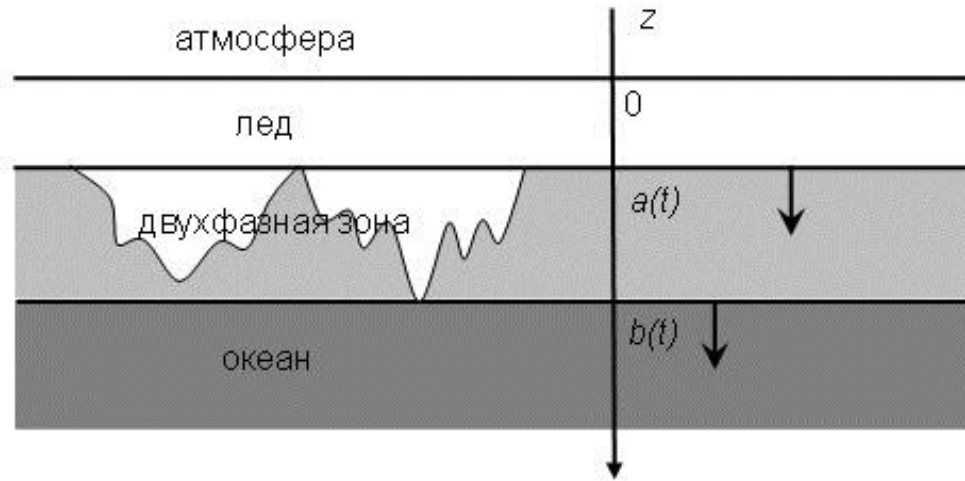


Рис. 10. Схема процесса кристаллизации сверху от холодной атмосферы при наличии двухфазной зоны.

$$T_m(z, t) = T_1(t) + zT_2(t), \quad a(t) < z < b(t), \quad (106)$$

где $a(t)$ и $b(t)$ - границы зоны: лед - двухфазная зона и двухфазная зона - вода соответственно. Функции $T_1(t)$ и $T_2(t)$ находятся из решения задачи (подчеркнем, что наклоны распределений (105) и (106) разные). Однако, линейность температуры $T_m(z, t)$ означает не только, что время существенного увеличения зоны намного больше времени релаксации температурного поля, но и малость изменений доли твердой фазы в зоне (последнее согласуется с полученным решением и обсуждается ниже).

Учитывая, что коэффициент диффузии намного меньше коэффициента температуропроводности, запишем уравнение баланса массы в двухфазной зоне

$$\frac{\partial}{\partial t}((1-\varphi)C_m) = 0, \quad a(t) < z < b(t), \quad (107)$$

где φ - доля твердой фазы в двухфазной зоне, а C_m - соленость морской воды (интегрирование уравнения (107) дает хорошо известную формулу Шейла). Уравнение (107) подразумевает, что вся соль вытесняется льдом в жидкую матрицу системы. Будем считать, что двухфазная зона находится в состоянии термодинамического равновесия, тогда

температура и концентрация соли связаны уравнением ликвидус

$$T_m = -mC_m, \quad a(t) < z < b(t), \quad (108)$$

где m - коэффициент наклона линии ликвидус.

На границе лед - двухфазная зона выполняются условия непрерывности температуры, а также баланса тепла и массы:

$$\varphi = \varphi_a, \quad T_i = T_m, \quad z = a(t), \quad (109)$$

$$L_v(1 - \varphi_a) \frac{da}{dt} = k_i \frac{\partial T_i}{\partial z} - [k_i \varphi_a + k_w(1 - \varphi_a)] \frac{\partial T_m}{\partial z}, \quad z = a(t), \quad (110)$$

$$C_m(1 - \varphi_a) \frac{da}{dt} = -D_w(1 - \varphi_a) \frac{\partial C_m}{\partial z}, \quad z = a(t). \quad (111)$$

Здесь $\varphi_a = \varphi_a(t)$ - доля твердой фазы на границе лед - зона (определяется решением задачи), k_w - коэффициент теплопроводности воды, D_w - коэффициент диффузии в воде.

На границе двухфазная зона - океан выполняются условия непрерывности температуры и баланса тепла:

$$\varphi = \varphi_b, \quad T_m = T_p, \quad z = b(t), \quad (112)$$

$$L_v \varphi_b \frac{db}{dt} = [k_i \varphi_b + k_w(1 - \varphi_b)] \frac{\partial T_m}{\partial z}, \quad z = b(t), \quad (113)$$

где φ_b - доля твердой фазы на границе зона - океан, а T_p - постоянная температура морской воды при $z \geq b(t)$. Специально отметим, что в рамках рассматриваемой модели, на этой границе отсутствует аналог условия (111) баланса массы. Это вызвано тем обстоятельством, что изменение градиента температуры при $z = b(t)$ со стороны зоны (при постоянной температуре в океане) приводит к соответствующему изменению концентрационного градиента в точке $z = b(t)$ и, соответственно, к изменению протяженности двухфазной зоны в

соответствии с условием концентрационного переохлаждения

$$\frac{\partial T_m}{\partial z} = -m \frac{\partial C_m}{\partial z},$$

справедливом как внутри двухфазной зоны, так и на ее границах. Поясним физический смысл сказанного. Понижение температуры в призонном слое в океане приводит к началу кристаллизации, которая идет до тех пор, пока концентрация не достигнет значения, соответствующего равновесию при данной температуре.

Интегрируя уравнение (107) с учетом выражений (106) и (108) и граничного условия (112), получаем распределение доли твердой фазы в двухфазной зоне

$$\varphi(z, t) = 1 + \frac{T_p (\varphi_b - 1)}{T_1(t) + zT_2(t)}. \quad (114)$$

Подставляя выражения (105), (106), (108), (114) в граничные условия (109)-(113), получим:

$$\varphi_a(t) = 1 + \frac{T_p (\varphi_b - 1)}{T_a(t) + C_1(t)a(t)}, \quad (115)$$

$$C_1(t) = \frac{L_v(1 - \varphi_a)}{k_i} \frac{da}{dt} + [\varphi_a + K(1 - \varphi_a)]T_2(t), \quad K = \frac{k_w}{k_i}, \quad (116)$$

$$T_a(t) + C_1(t)a(t) = T_p + T_2(t)(a(t) - b(t)), \quad (117)$$

$$[T_2(t)(b(t) - a(t)) - T_p](1 - \varphi_a) \frac{da}{dt} = D_w(1 - \varphi_a)T_2(t), \quad (118)$$

$$T_2(t) = \frac{L_v \varphi_b}{\Phi} \frac{db}{dt}, \quad \Phi = \Phi(\varphi_b) = k_i \varphi_b + k_w(1 - \varphi_b), \quad (119)$$

$$T_1(t) = T_p - b(t)T_2(t). \quad (120)$$

Из выражения (115) видно, что если $\varphi_a = 1$, то $\varphi_b = 1$, т.е. вся зона заполнена твердой фазой (фронтальная модель). Поскольку это не так, заключаем, что $\varphi_a \neq 1$ и множитель $1 - \varphi_a$ в условии (118) можно сократить.

Комбинируя условия (115), (117) и (119), находим долю твердой фазы на границе лед - двухфазная зона:

$$\varphi_a(t) = 1 + \frac{T_p(\varphi_b - 1)}{T_p + \frac{L_v \varphi_b}{\Phi} \frac{db}{dt}(a(t) - b(t))}. \quad (121)$$

Далее, подставляя функцию $T_2(t)$ из (119) в (118), имеем:

$$\left[(a(t) - b(t)) \frac{L_v \varphi_b}{\Phi} \frac{db}{dt} + T_p \right] \frac{da}{dt} = - \frac{D_w L_v \varphi_b}{\Phi} \frac{db}{dt}. \quad (122)$$

Учитывая теперь, что скорости движения обеих границ достаточно маленькие [109, 110] (пренебрегая слагаемым, содержащим произведение $(da/dt)(db/dt)$), получаем линейное дифференциальное уравнение, связывающее $a(t)$ и $b(t)$. Интегрируя это уравнение с учетом начальных условий $a(0) = b(0) = 0$, находим:

$$a(t) = - \frac{D_w L_v \varphi_b}{T_p \Phi} b(t). \quad (123)$$

Данные начальные условия допустимы, так как характерные времена наблюдений [109] намного превосходят времена зарождения двухфазной зоны.

Подставляя $C_1(t)$ и $T_2(t)$ из выражений (116) и (119) в условие (117), исключая $\varphi_a(t)$ с помощью соотношения (121), получим нелинейное дифференциальное уравнение, содержащее функции $a(t)$ и $b(t)$:

$$L_v T_p (\varphi_b - 1) \left[(1 - K) \frac{\varphi_b}{\Phi} \frac{db}{dt} - \frac{1}{k_i} \frac{da}{dt} \right] a(t) =$$

$$= \left(T_p - T_a(t) - \frac{L_v \varphi_b}{\Phi} b(t) \frac{db}{dt} \right) \left[(a(t) - b(t)) \frac{L_v \varphi_b}{\Phi} \frac{db}{dt} + T_p \right]. \quad (124)$$

Далее, подставляя выражение в квадратных скобках из (122) в (124), учитывая (123) и выполняя необходимые преобразования, приходим к линейному дифференциальному уравнению относительно $b^2(t)$:

$$\frac{I}{2} \frac{db^2}{dt} = T_p - T_a(t),$$

где

$$I = \frac{L_v \varphi_b}{\Phi} \left[1 - \frac{D_w L_v \varphi_b}{T_p \Phi} \left(\frac{L_v D_w}{k_i T_p} + 1 - K \right) (\varphi_b - 1) \right].$$

Интегрируя последнее уравнение с учетом условия $b(0) = 0$, получаем закон движения границы двухфазная зона - океан:

$$b(t) = \sqrt{\frac{2}{I} \left(T_p t - \int_0^t T_a(\alpha) d\alpha \right)}. \quad (125)$$

Из выражения (125) видно, что при постоянной температуре T_a атмосферы, закон движения обеих границ зоны, как и следовало ожидать, становится автомодельным [72]. В случае изменяющейся температуры атмосферы границы $a(t)$ и $b(t)$ находятся между двумя автомодельными режимами, соответствующими максимальной (T_{max}) и минимальной (T_{min}) температурам атмосферы за период наблюдений. Так, например, для границы $b(t)$, имеем

$$\sqrt{\frac{2}{I} (T_p - T_{max}) t} \leq b(t) \leq \sqrt{\frac{2}{I} (T_p - T_{min}) t}.$$

Другими словами, выражение (125) демонстрирует влияние временной дисперсии на динамику процесса.

Таким образом, решение рассматриваемой нелинейной нестационарной задачи

полностью определяется выражениями (105), (106), (108), (114), (116), (119)-(121), (123), (125) в явном аналитическом виде. Необходимо специально отметить, что полученное решение зависит от свободного параметра φ_b , который в рамках данной модели не определяется. Величина φ_b подбирается путем сопоставления теории и наблюдений для одной из расчетных зависимостей. При этом все остальные зависимости становятся определенными для любых глубин и времен процесса.

Представляет интерес сопоставление результатов развиваемой в работе теории двухфазной зоны с фронтальной теорией. Если формально принять, что $\varphi_b = 1$ (т.е. если считать, что вся двухфазная зона заполнена твердой фазой), то можно заметить, что выражение (125) переходит в выражение (104), $\varphi_a(t)$ и $\varphi(z,t)$ обращаются в единицу, $T_1(t)$ и $C_1(t) = T_2(t)$ соответственно переходят в $T_a(t)$ и $a_1(t)$. Другими словами, решение задачи с двухфазной зоной в предельном случае имеет переход к фронтальному решению.

На рисунках 11 и 12 представлено сравнение развиваемой теории с экспериментальными наблюдениями [109] (см. также [110]). Свободный параметр φ_b варьировался и подбирался таким образом, чтобы лучше всего удовлетворить одной из наблюдаемых зависимостей (как видно, остальные зависимости также хорошо описываются теорией при данном значении φ_b). Все кривые, построенные для двух значений свободного параметра φ_b , существенно отличаются от фронтальных решений и прекрасно описывают динамику результатов измерений толщины льда и температурные колебания на различных расстояниях от поверхности.

Рис. 13 иллюстрирует динамику изменения доли твердой фазы на границе лед - двухфазная зона. Можно отметить, что практически на всех временах процесса доля φ_a , а также и φ ($\varphi_b \leq \varphi \leq \varphi_a$), претерпевает лишь незначительные изменения как с координатой, так и со временем (быстрый рост φ происходит лишь на начальных временах (порядка 100 минут) процесса кристаллизации, когда начинает замерзать тонкая корочка льда у поверхности). Поэтому, линейный профиль температуры в двухфазной зоне, приближенно описываемый уравнением теплопроводности вида $\partial^2 T_m(z,t)/\partial z^2 = 0$, представляется вполне обоснованным. Учитывая сказанное и используя уравнение (108), теперь нетрудно показать справедливость уравнения (107).

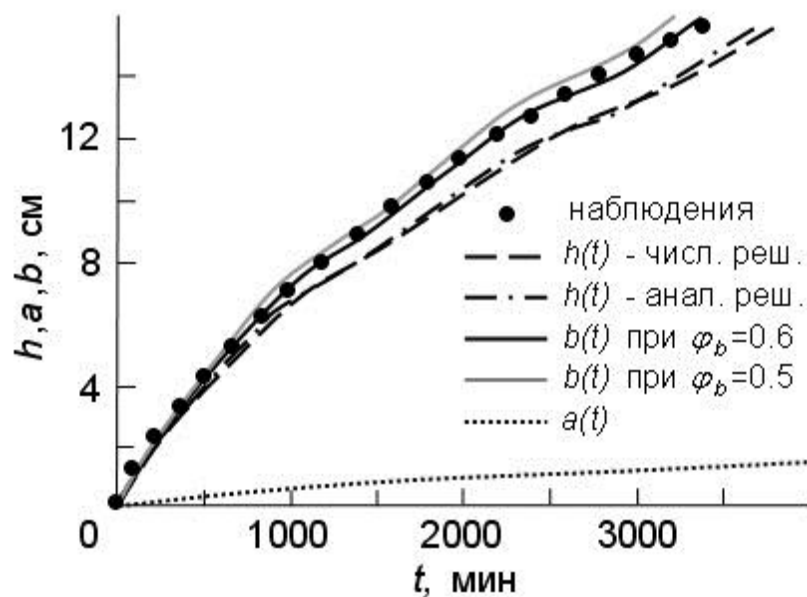


Рис. 11. Толщина льда в зависимости от времени согласно наблюдениям работ [109, 110], фронтальной модели роста льда и модели двухфазной зоны.

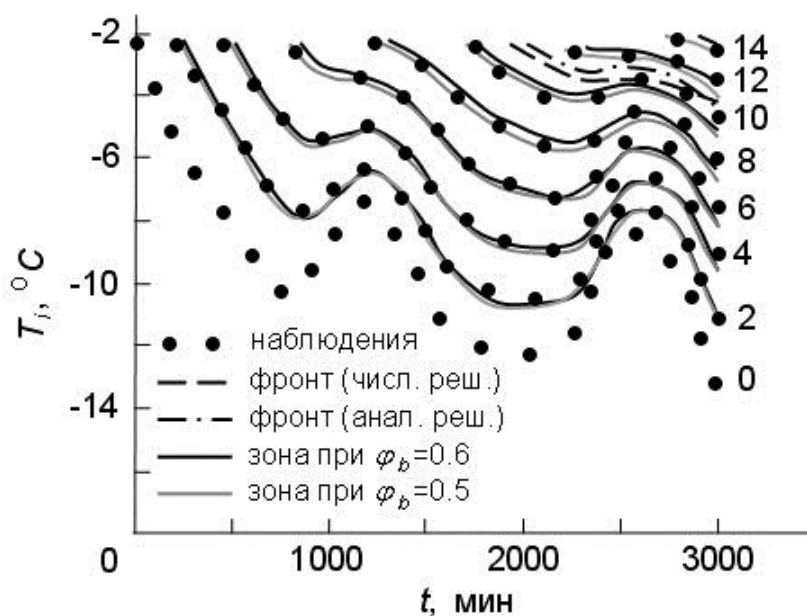


Рис. 12. Температура в зависимости от времени на фиксированной глубине, отсчитываемой от поверхности льда (цифры у кривых). Кружки изображают данные наблюдений [109, 110].

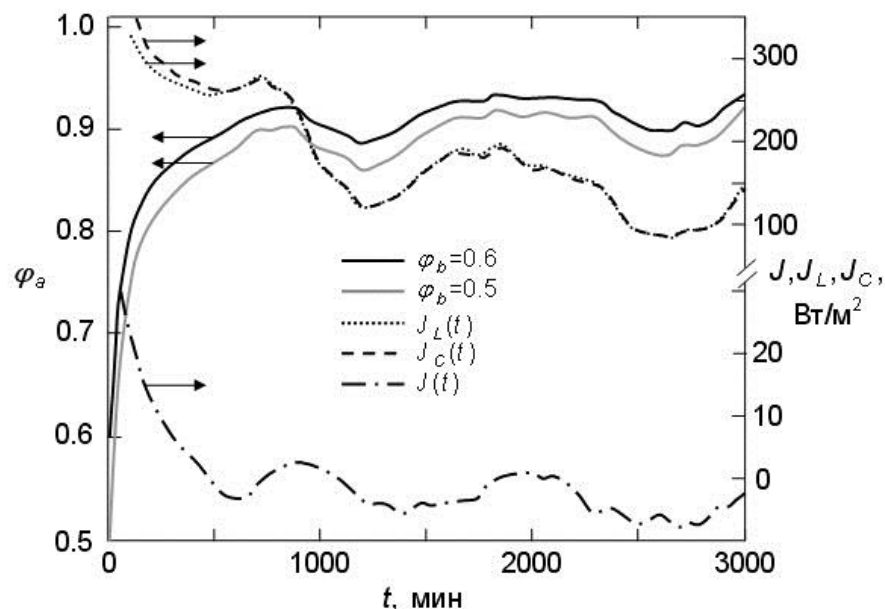


Рис. 13. Зависимости доли твердой фазы на границе лед – двухфазная область и тепловых потоков от времени.

Представляется важным отметить, что наблюдаемая в природе граница льда и океана не разделяет чистый лед и замерзающий океан, а разделяет двухфазную среду с высоким содержанием льда ($\varphi: 0.5 \div 0.9$, ср. с рис. 13) и морскую воду без льдинок (рис. 11, зависимость $b(t)$). Граница $a(t)$, отделяющая чистый лед от двухфазной среды, значительно отстает от границы $b(t)$ в силу того, что в зоне с высоким содержанием льда процесс кристаллизации сильно затруднен в силу повышенного содержания соли в жидкой матрице зоны. Это связано с тем обстоятельством, что кристаллизующийся лед вытесняет практически всю примесь, а характерные времена ее диффузионного отвода намного превосходят времена релаксации поля температуры. Когда же такой процесс изучается в природе или лаборатории, граница льда и воды регистрируется вмораживаемым в лед датчиком температуры, не анализирующим долю твердой фазы вокруг себя (кроме того, такой датчик сам может стать центром кристаллизации). Поэтому измерения на практике границы $b(t)$ (а не $a(t)$) являются вполне логичными и хорошо описываемыми в рамках развиваемой теории.

С поверхности льда в атмосферу излучается тепловой поток, равный произведению коэффициента теплопроводности льда на градиент температуры в точке $z=0$. В рамках данной модели этот поток представляется в виде $J_c(t) = k_i C_1(t)$. Отводимый в атмосферу

поток $J_C(t)$ обусловлен потоком скрытого тепла, выделяющегося в процессе кристаллизации

$$J_L(t) = \frac{L_V}{b(t) - a(t)} \int_{a(t)}^{b(t)} \varphi(z) dz \left(\frac{db}{dt} - \frac{da}{dt} \right),$$

и некоторыми другими факторами. На рис. 13 изображена динамика тепловых потоков, показывающая, что $J_C(t)$ и $J_L(t)$ очень близки друг к другу. В рамках рассматриваемой модели остаточный тепловой поток $J(t) = J_C(t) - J_L(t)$ (см. рис. 13) обусловлен теплотой, отводимой от океана в атмосферу. Отметим, что этот поток является существенным лишь на начальной стадии процесса (рис. 13 показывает, что позднее он падает в несколько раз). Другими словами, это происходит на временах значительного изменения доли твердой фазы в двухфазной зоне. Обратим внимание на то обстоятельство, что уменьшение теплового потока $J(t)$ происходит в моменты времени, соответствующие падению температуры в атмосфере и наиболее быстрому росту зоны (эти моменты времени на рис. 11 выражены "горбами" функции $b(t)$). На флуктуации потока $J(t)$ (соответствующие временам, характеризующим сформировавшуюся зону) также могут влиять: радиационная составляющая, вызванная потоком солнечного излучения, неоднородность температуры и конвективные течения в океане, и т.п. Изучение этих факторов оставляет широкое поле деятельности для будущих исследований.

В заключение, в этой части работы исследована нелинейная динамика замерзания морской воды в трещинах вековых льдов Арктики и Антарктики. Общими выводами являются:

1. В работе развита и обоснована математическая модель, описывающая кристаллизацию молодых льдов (и других систем, практически полностью вытесняющих примесь), на основе представлений о равновесной двухфазной зоне. Данная модель, существенно отличающаяся от фронтальной модели и известных ранее подходов, адекватно описывает физическую картину процесса и хорошо согласуется с наблюдениями.

2. В рамках развиваемой модели, впервые получено аналитическое решение нелинейной нестационарной проблемы кристаллизации морской воды при произвольных изменениях со временем температуры атмосферы на поверхности льда. При этом, выражения (123) и (125) определяют точный вид законов движения границ фазового перехода и протяженность двухфазной зоны. Эти выражения также показывают, что сильно нестационарный режим кристаллизации находится между двумя автомодельными режимами,

соответствующими максимальной и минимальной температурам за период наблюдений.

3. Двухфазная зона представляет собой область с высоким содержанием льда (большая доля твердой фазы). Граница фазового перехода лед - двухфазная зона сильно отстает от границы фазового перехода двухфазная зона - океан благодаря практически полному вытеснению льдом соли в окружающую его жидкую матрицу системы.

4. В рамках рассматриваемой модели получены аналитические выражения для кондуктивного (исходящего с поверхности льда в атмосферу) потока тепла и потока скрытого тепла (выделяющегося в процессе кристаллизации), которые оказываются достаточно близкими друг к другу практически на всех стадиях (за исключением, может быть, лишь самых начальных) процесса. Указанные потоки тепла, исходящие в атмосферу при образовании молодого льда, намного превосходят потоки, исходящие через вековой лед, и определяют динамику теплового бюджета планеты во льдах Арктики и Антарктики.

Кристаллизация снизу с ложным дном

Предположим теперь, что при повышении температуры атмосферы в весенне-летний период времени на поверхности льда образуется талая вода. Эта вода будет просачиваться под лед и, вступая в контакт с соленой морской водой под его поверхностью, будет приводить к образованию корки льда, разделяющей океан от слоя основного льда. Другими словами, в процессе замерзания будет появляться ложное (или второе) дно. Слой пресной воды, разделяющий слои льда имеет нулевую температуру и, поэтому, кристаллизация сверху и снизу становятся независимыми друг от друга. Это позволяет отдельно рассмотреть задачу об эволюции ложного дна. Приведем в начале несколько важных особенностей возникновения таких структур льда в природе.

Проникновение талой воды, собирающейся в лужи на поверхности льда, через трещины под его основание, приводит к образованию подледных талых прудов. При этом соленость морской воды около льда падает практически до нулевых значений [111]. Возникающее переохлаждение и конвекция приводят к зарождению и срастанию кристаллов льда, формирующих ледяную корку под поверхностью ледяного покрова между слоями соленой и пресной воды, называемую ложным дном [112, 113]. Механизмы зарождения и последующего роста ложного дна были подтверждены лабораторными исследованиями [114], где выявлены следующие стадии процесса: первоначальная конвекция, образование и боковой рост кристаллов льда, формирование ледяной корки и ее последующий рост вверх в направлении талой (пресной) воды. В естественных условиях ложное дно может

формироваться в течение нескольких часов [115], распространяться в ширину до нескольких метров, иметь толщину несколько дециметров и скорость роста порядка нескольких сантиметров в день [116]. Нансен отмечал, что значительный прирост льда в летние месяцы происходит за счет замерзания воды под ледяным покровом [117]. Наличие ложного дна существенным образом уменьшает скорость плавления тонкого льда [118] и приводит к уменьшению его отражательной способности [115]. Можно также отметить, что дренаж пресной воды сквозь ледовую толщу и ее аккумулярование под ней играют важную роль при транспорте загрязняющих примесей и биологических организмов под лед с возможным последующим их вмораживанием благодаря росту ложного дна [119].

Экспериментальные данные показывают, что фазовый переход при замерзании ложного дна протекает в протяженной области, заполненной твердой и жидкой фазами [114, 120]. Математические модели, учитывающие наличие такой области - двухфазной зоны и турбулентного движения жидкости в океане, до настоящего времени практически не рассматривались. Возможно это связано с их чрезвычайной сложностью в определении всех параметров, нестационарностью уравнений и границ фазового перехода. В настоящем исследовании приведена такая нелинейная модель и получены ее точные аналитические решения.

Рассмотрим процесс направленной кристаллизации зародившегося ложного дна вдоль пространственной оси z , направленной вертикально вверх (рис. 14). Будем считать, что талая вода и двухфазная зона соответственно располагаются в областях $a(t) < z < 0$ и $b(t) < z < a(t)$, а соленая вода находится в регионе $z < b(t)$. Здесь $a(t)$ и $b(t)$ обозначают положения границ фазового перехода «талая вода - двухфазная зона» и «двухфазная зона – океан». Температурный профиль в двухфазной зоне будем предполагать линейной функцией пространственной координаты

$$T_m(z, t) = \frac{T_a(t)(z - b(t)) + T_b(t)(a(t) - z)}{a(t) - b(t)}, \quad a(t) < z < b(t), \quad (126)$$

где $T_a(t)$ и $T_b(t)$ - температуры на границах $a(t)$ и $b(t)$ (эти функции определяются решением). Линейность температурного профиля означает, что в уравнении теплопроводности опущена производная температуры по времени, а доля твердой фазы претерпевает несущественные временные колебания [77]. Этот вывод также подтверждается экспериментально [114].

Учитывая, что диффузионные потоки через границы $a(t)$ и $b(t)$ двухфазной зоны

практически отсутствуют [114], запишем уравнение баланса массы в двухфазной области:

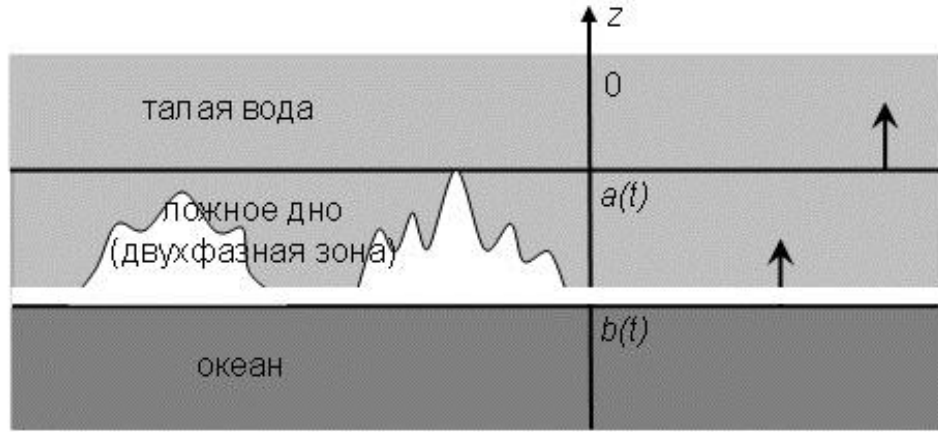


Рис. 14. Схема процесса кристаллизации с ложным дном по направлению снизу вверх, от океана к атмосфере.

$$\frac{\partial}{\partial t}((1-\varphi)S_m) = 0, \quad a(t) < z < b(t), \quad (127)$$

где φ - доля твердой фазы в двухфазной зоне, S_m - соленость морской воды.

Будем считать, что двухфазная зона находится в состоянии термодинамического равновесия, тогда температура и соленость связаны уравнением ликвидус [114, 115]

$$T_m(z, t) = -mS_m(z, t), \quad (128)$$

где m - коэффициент наклона линии ликвидус.

Будем также считать, что тепловой и диффузионный потоки на границе $z = a(t)$ со стороны чистой воды вносят незначительные вклады [114]. В этом случае пограничные условия баланса тепла и массы на этой границе имеют вид:

$$L_v \varphi_a \frac{da}{dt} = (k_i \varphi_a + k_w (1 - \varphi_a)) \frac{\partial T_m}{\partial z}, \quad (129)$$

$$S_a \frac{da}{dt} = -D \frac{\partial S_m}{\partial z}. \quad (130)$$

Здесь L_v - скрытая теплота кристаллизации, D - коэффициент диффузии, k_i и k_w - коэффициенты теплопроводности льда и воды. Специально отметим, что условие (130) означает, что диффузия примеси непосредственно следует за смещением границы $a(t)$ (это модельное предположение подтверждается лабораторными экспериментами [114], где процесс замерзания происходил при очень малом градиенте солености в области $z \geq a(t)$).

Поскольку тепло- и массоперенос на границе $z = b(t)$ со стороны соленой воды существенным образом зависит от турбулентного течения жидкости, запишем граничные условия следующим образом [115, 121, 122]:

$$L_v \varphi_b \frac{db}{dt} = (k_i \varphi_b + k_w (1 - \varphi_b)) \frac{\partial T_m}{\partial z} + \alpha_h \rho_w c_w u (T_\infty - T_b), \quad (131)$$

$$S_b \varphi_b \frac{db}{dt} = \alpha_s u (S_\infty - S_b), \quad (132)$$

где α_h и α_s - коэффициенты турбулентного переноса, ρ_w и c_w - плотность и теплоемкость воды, u - скорость трения, T_∞ и S_∞ - значения температуры и солености в океане вдали от границы $b(t)$. Нижние индексы a и b в выражениях (129)-(132) обозначают величины на границах $a(t)$ и $b(t)$ соответственно.

В работах [122, 123] показано, что $\alpha_h/\alpha_s = (\kappa D)^n$, где $2/3 < n < 4/5$, а κ - коэффициент температуропроводности. Полагая $\kappa = 1.4 \cdot 10^{-3}$ м²/с и $D = 6.8 \cdot 10^{-6}$ м²/с, имеем [115]: $35 \leq \alpha_h/\alpha_s \leq 70$.

Модель (126)-(132) представляет собой нелинейную систему уравнений и граничных условий, описывающих нестационарный процесс кристаллизации ложного дна с двухфазной зоной при учете турбулентного течения жидкости у границы между соленой водой и двухфазной зоной.

Интегрирование уравнения (127) с учетом зависимости (128) определяет долю твердой фазы в двухфазной зоне:

$$\varphi(z, t) = 1 + \frac{(\varphi_b - 1) T_b}{T_m(z, t)}, \quad (133)$$

где T_m определена выражением (126).

Из выражений (128)-(130) находим долю твердой фазы на границе $a(t)$:

$$\varphi_a(t) = \frac{KT_a(t)}{(K-1)T_a(t) - T_p}, \quad K = \frac{k_w}{k_i}, \quad T_p = \frac{DL_v}{k_i}. \quad (134)$$

Комбинируя теперь выражения (133) и (134), определяем температуру T_b на границе между двухфазной зоной и соленой водой:

$$T_b(t) = \frac{T_a^2(t) + T_a(t)T_p}{(\varphi_b - 1)((K-1)T_a(t) - T_p)}. \quad (135)$$

Исключая db/dt из граничных условий (131) и (132), вычитая скорости движения границ из условий (129) и (132), принимая во внимание уравнение (128) линии ликвидус и учитывая, что

$$\frac{\partial T_m}{\partial z} = -m \frac{\partial S_m}{\partial z} = \frac{T_a(t) - T_b(t)}{a(t) - b(t)},$$

получаем нелинейную систему уравнений для определения толщины двойного дна и температуры T_a :

$$a(t) - b(t) = P_1(T_a(t), t), \quad \frac{d(a-b)}{dt} = \frac{P_2(T_a(t))}{a-b} + P_3(T_a(t), t), \quad (136)$$

где

$$P_1 = -\frac{(k_i\varphi_b + k_w(1-\varphi_b))(T_a - T_b)T_b}{\alpha_s u L_v (T_b + mS_\infty) + \alpha_h \rho_w c_w u (T_\infty - T_b)T_b},$$

$$P_2 = \frac{(k_i\varphi_a + k_w(1-\varphi_a))(T_a - T_b)}{L_v \varphi_a}, \quad P_3 = \frac{\alpha_s u (T_b + mS_\infty)}{T_b \varphi_b}.$$

Если скорость u , значения температуры T_∞ и концентрации соли S_∞ считаются независимыми от времени величинами или заменяются таковыми (см., например, [115]), то нелинейная система (136) имеет точное аналитическое решение. В этой ситуации коэффициенты P_1 и P_3 явно не зависят от временной переменной t , а являются функциями только T_a . Исключая из системы (136) толщину $h(t) = a(t) - b(t)$ ложного дна, определяем зависимость времени от температуры T_a :

$$t(T_a) = \int_{T_{a0}}^{T_a} G(T_a) dT_a, \quad G(T_a) = \frac{dP_1(T_a)}{dT_a} \frac{P_1(T_a)}{P_2(T_a) + P_1(T_a)P_3(T_a)}. \quad (137)$$

Из выражения (137) по найденной зависимости $t(T_a)$ нетрудно определить обратную функцию $T_a(t)$.

Если хотя бы одна из величин u , S_∞ или T_∞ становится зависящей от времени, тогда исключая $a(t) - b(t)$ из уравнений (136), приходим к задаче Коши для определения зависимости $T_a(t)$:

$$\frac{dT_a(t)}{dt} = g(T_a, t), \quad (138)$$

где $g(T_a, t)$ известная функция. При этом, начальное значение T_{a0} температуры T_a определяется из первого уравнения (136).

Интегрируя уравнение (132) с учетом (128), находим закон движения границы ложное дно - океан:

$$b(t) = b(0) - \int_0^t \frac{\alpha_s u(T_b(T_a) + mS_\infty)}{T_b(T_a)\varphi_b} dt, \quad (139)$$

где функции $T_b(T_a)$ и $T_a(t)$ определяются выражениями (135), (137) и (138). Закон движения второй границы $a(t)$ между двухфазной зоной и талой водой теперь известен и определяется первым соотношением (136).

Для сравнения развиваемой теории с данными наблюдений на рис. 15 показана динамика изменения координаты $b_0(t) = b(t) - b(0)$ ложного дна в соответствии с выражением

(139) при различных значениях скорости трения (две зависимости построены для осредненных фиксированных значений u при помощи (137), одна - при u , рассчитанном из теории подобия в работе [115], при помощи (138)). Значение доли твердой фазы на границе между соленой водой и ложным дном традиционно принималось близким к единице (см., например, [115]), $\varphi_b = 0.99$ ($\varphi_b \rightarrow 1$). На рис. 16 показаны колебания доли твердой фазы на границе $a(t)$ и тепловой поток $J = \alpha_h \rho_w c_w u (T_\infty - T_b)$ на границе $b(t)$, направленный вертикально вниз. Настоящая теория позволяет оценить правильность выбора значения коэффициента $\alpha_h = 0.0095$ турбулентного переноса по данным работы [115]. Для этого выразим указанный коэффициент через число Стэнтона:

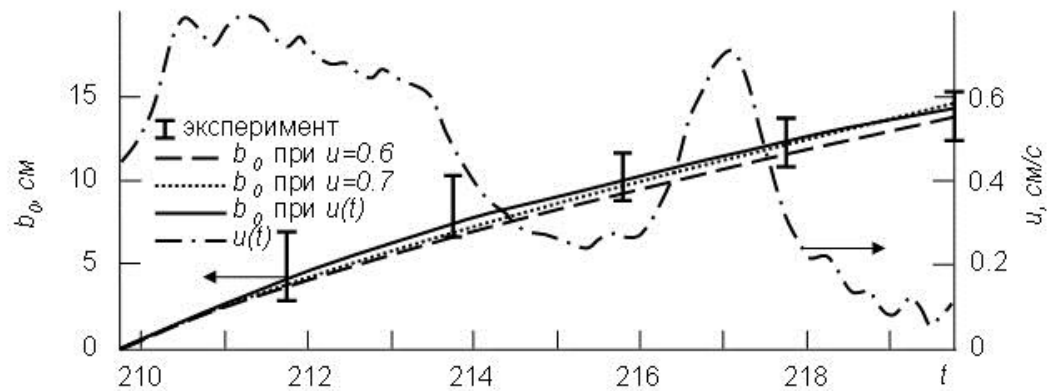


Рис. 15. Зависимость скорости трения u (шкала значений справа) от времени по данным наблюдений "AIDJEX" (см., например, [115]). Экспериментальное и теоретическое значения координаты b_0 (шкала значений слева) в зависимости от времени в соответствии с наблюдениями "AIDJEX" и настоящей теорией. Время по горизонтальной оси выражено в днях 1975 года согласно наблюдениям "AIDJEX".

$$St = - \frac{\alpha_h (T_\infty - T_b)}{T_\infty - T_f},$$

где T_f - температура замерзания морской воды при солёности S_∞ . Выражая отсюда коэффициент α_h и усредняя его по времени в соответствии с данными наблюдений "AIDJEX" от 0 до $\tau = 10.25$ суток, получим

$$\langle \alpha_h \rangle = -\frac{1}{\tau} \int_0^\tau \frac{\text{St}(T_\infty + mS_\infty)}{T_\infty - T_b} dt,$$

что составляет порядка четырех процентов от расчетного значения $\alpha_h = 0.0095$ (при скорости $u = 0.6$ м/с и $\text{St} = 0.0055$, выбранном по данным работы [115]).

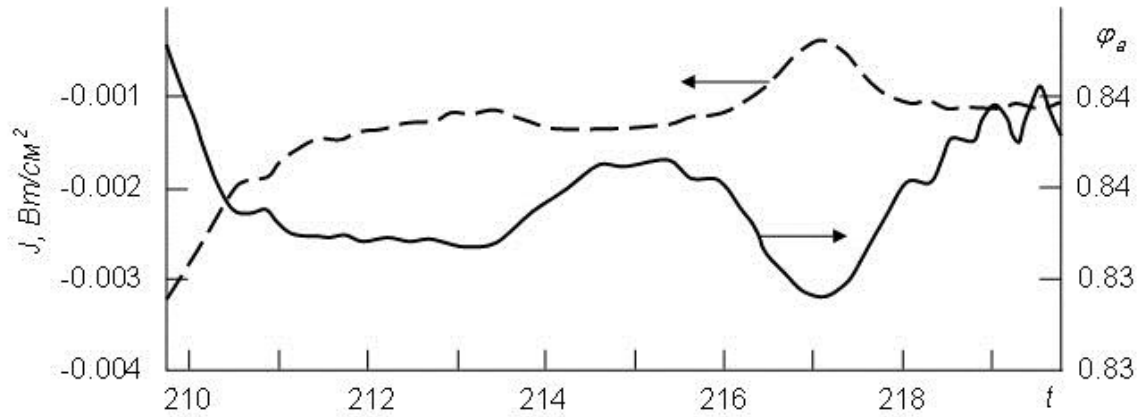


Рис. 16. Доля φ_a твердой фазы и тепловой поток J в зависимости от времени, определенные при временных колебаниях скорости (см. рис. 15). Время по горизонтальной оси выражено в днях 1975 года согласно наблюдениям "AIDJEX".

В реальных ситуациях значения температуры T_∞ и солёности S_∞ могут изменяться со временем, как и значение скорости u . Такие изменения, в соответствии с данными наблюдений, показаны на рис. 17 и 18 по данным работы [115]. На основе выражений (138) и (139) с учетом этих зависимостей была определена толщина $h(t) = a(t) - b(t)$ ложного дна и тепловой поток на границе между морской водой и ложным дном (см. рис. 18).

Развитая в работе теоретическая модель и полученные на ее основе решения позволяют сделать следующие выводы. Модельные расчеты по протяженности двухфазного слоя ложного дна и положениям его границ фазового перехода соответствуют данным наблюдений [114-116]. Тепловой поток $J(t)$ на нижней границе дна сильно зависит от колебаний температуры $T_\infty(t)$ на глубине и осцилляций скорости $u(t)$. В частности, как показывает рис. 18, внезапное увеличение скорости может приводить к изменению знака потока J . Другими словами, направление потока в эти моменты времени меняется с направления вниз в глубину океана на направление вверх в сторону льда. Физически это связано с увеличением потока массы в соответствии с уравнением (132) и размыванием

границы между соленой водой и ложным дном.

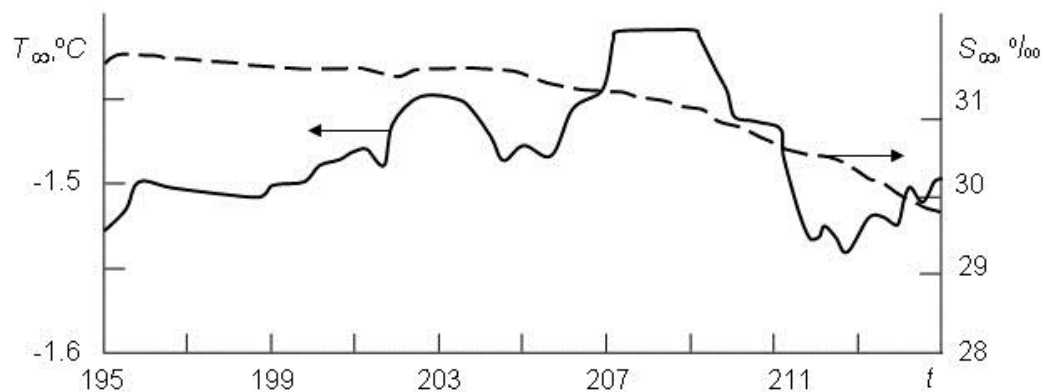


Рис. 17. Зависимости температуры и солёности морской воды вдали от границы $b(t)$ фазового перехода по данным наблюдений "SHEBA" (см., например, [115]). Время по горизонтальной оси выражено в днях 1998 года согласно наблюдениям "SHEBA".

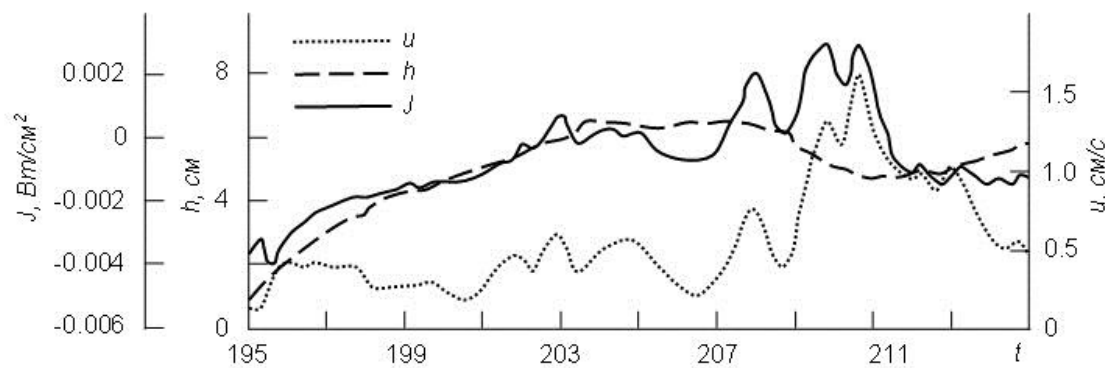


Рис. 18. Скорость трения u по данным наблюдений "SHEBA" ([115]), толщина h двойного дна и тепловой поток J согласно настоящей теории. Время по горизонтальной оси выражено в днях 1998 года согласно наблюдениям "SHEBA", $a(0) - b(0) = 1$ см.

Увеличение потока массы на границе $b(t)$ приводит к падению температуры $T_b(t)$. Ее величина становится ниже температуры $T_\infty(t)$ на глубине, в результате чего тепловой поток идет из глубины океана в направлении ложного дна. Рис. 16 и 18 демонстрируют, что величина теплового потока, связанного с замерзанием ложного дна, сравнима по величине с другими вкладами в результирующий тепловой поток (см., например, [124]). Последнее

означает, что данный тепловой поток может оказывать существенное влияние на теплообмен между океаном и атмосферой, что особенно проявляется в летний период, для которого характерны процессы образования и эволюции ложного дна [115, 116].

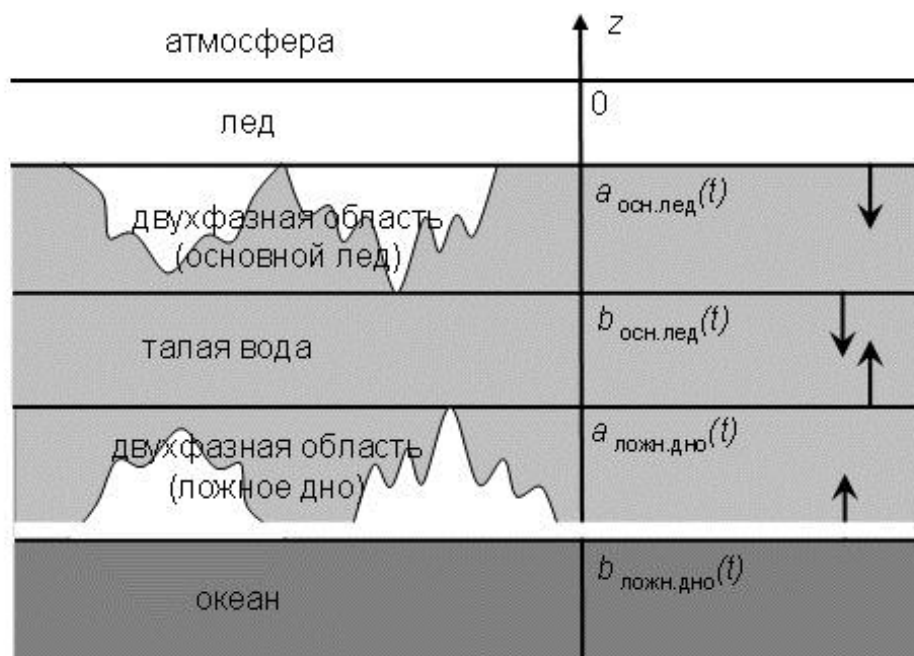


Рис. 19. Схема процесса замерзания сверху и снизу при наличии двух областей фазового перехода.

Поскольку решения двух задач о кристаллизации льда сверху и замерзании ложного дна снизу являются независимыми друг от друга, решение поставленной в проекте задачи описывается с помощью развитых теорий в настоящей части отчета. На рис. 19 приведено схематическое изображение процесса о затвердевании льда в трещинах, осложненное замерзанием ложного дна со стороны океана по направлению к атмосфере. При этом, все физические выводы о динамике изучаемых зависимостей, сделанные на основе решений двух независимых задач, остаются справедливыми при исследовании двух встречных процессов замерзания льда, показанных на рис. 19.

Отчет по обобщению и оценке результатов исследований

Проведенные по проекту «Динамика фазовых переходов при замерзании льда и ее влияние на теплообмен между океаном и атмосферой» научные исследования находятся на передовом уровне исследований по данному направлению развития мировой науки, что, в частности, подтверждается высоким уровнем публикаций авторского коллектива в престижных реферируемых журналах, а также защитой кандидатских диссертаций членами научной группы. Все задачи, поставленные в проекте, решены в полном объеме. Молодые члены научного коллектива (аспиранты и студенты) получили закрепление в научно-образовательной сфере. Такое же закрепление относится и к уже защитившим кандидатские диссертации молодым научным кадрам. Обобщением всей научной работы по проекту является решение сложных геофизических задач о замерзании льда при наличии движущихся границ фазовых переходов и нелинейных влияниях на кристаллизационный процесс различных факторов (например, колебаний атмосферной температуры). Коротко проделанную работу можно охарактеризовать следующим образом. Вначале был проведен анализ литературных источников и выполнены прогнозные исследования, позволившие выбрать оптимальные методы решения рассматриваемых проблем. Эта часть работы была разработана для разработки математической модели и метода ее решения для процессов замерзания воды в трещинах океанических льдов при учете турбулентных течений жидкости в океане и протяженной области фазового перехода. Затем был разработан метод решения задачи при учете турбулентных течений жидкости в океане и его неизотермичности. Были определены распределения температуры и солености, доли твердой фазы в области фазового перехода, исследована динамика положений границ фазового перехода лед – двухфазная зона и двухфазная зона – океан. Эти характеристики процесса позволили рассчитать поправки к тепловому потоку, исходящему с поверхности льда в атмосферу, которые вызваны замерзанием воды в трещинах льда. Данные исследования были проведены с учетом дополнительных работ, учитывающих развитие ложного (второго) дна. Далее были разработаны математическая модель и методы ее решения для исследования влияния волновых течений жидкости на процессы роста океанических льдов при учете пористости льда, протяженной области фазового превращения, неоднородного распределения давления. Был произведен анализ морфологической устойчивости, который позволил определить критические значения частоты колебаний и волнового числа при которых происходит наступление режима неустойчивости. Затем были разработаны математическая модель и методы ее решения для дендритного роста льда при учете турбулизации жидкости на его

поверхности. Данное исследование позволило изучить динамику роста изолированных дендритных структур, растущих в переохлажденной морской воде, с учетом течений жидкости вблизи межфазной границы лед – океан. Были разработаны модели и методы их решения для кристаллизации воды в трещинах льдов с учетом процессов образования и роста ложного дна.

Публикации результатов НИР

Заключения экспертной комиссии по открытому опубликованию



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
ГОУ ВПО «УрГУ»

А.О. Иванов
(подпись)

« 07 » апреля 2010 г.

Экспертное заключение о возможности опубликования

Я, председатель экспертной комиссии (или руководитель-эксперт) заведующий лабораторией математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах

(наименование подразделения)

Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького», рассмотрев статью Александрова Д.В., Малыгина А.П. «Влияние конвекции, анизотропии и неоднородности среды на структурно-фазовые переходы в процессах кристаллизации» 14 страниц

(Ф.И.О. автора, вид, название материала, количество листов)

подтверждаю, что в материале не содержатся сведения, относящиеся к государственной тайне. Материал не патентоспособен и не содержит сведений конфиденциального характера и «ноу-хау».

На публикацию материалов не следует
(следует ли)

получить разрешение _____
(организации, данный пункт вводится при необходимости)

Заключение: это позволяет мне сделать заключение, что рассмотренный материал может быть опубликован в открытой печати и вывезен за границу для опубликования

Председатель комиссии (руководитель-эксперт)

Зав. лабораторией математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах

(должность, подпись, инициалы и фамилия)

А.Ю. Зубарев

Главный специалист ОНТИ УНИ

Н.П. Невраева

(подпись)

Начальник Первого отдела

А.Г. Гриппин

(подпись)



**Экспертное заключение
о возможности опубликования**

Я, председатель экспертной комиссии (или руководитель-эксперт) заведующий лабораторией математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах

(наименование подразделения)

Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького», рассмотрев статью Александрова Д.В., Низовцевой И.Г., Ли Д., Хуанга Х.-Н. «Затвердевание от охлаждаемой границы с двухфазной зоной при условиях нестурбулентного и турбулентного тепло и массопереноса в океане» (Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Lee D., Huang H.-N. «Solidification from a cooled boundary with a mushy layer under conditions of nonturbulent and turbulent heat and mass transfer in the ocean»), 14 страниц

(Ф.И.О. автора, вид, название материала, количество листов)

подтверждаю, что в материале не содержатся сведения, относящиеся к государственной тайне. Материал не патентоспособен и не содержит сведений конфиденциального характера и «ноу-хау».

На публикацию материалов не следует
(следует ли)

получить разрешение Федерального агентства по образованию
(организации, данный пункт вводится при необходимости)

Закключение: это позволяет мне сделать заключение, что рассмотренный материал может быть опубликован в открытой печати и вывезен за границу для опубликования

Председатель комиссии (руководитель-эксперт)

Зав. лабораторией математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах

(должность, подпись, инициалы и фамилия)

А.Ю. Зубарев

Главный специалист ОНТИ УНИ

(подпись)

Н.П. Невраева

Начальник Первого отдела


(подпись)

А.Г. Гришин



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
ГОУ ВПО «УрГУ»


(подпись) А.О. Иванов

« 04 » апреля 2010 г.

**Экспертное заключение
о возможности опубликования**

Я, председатель экспертной комиссии (или руководитель-эксперт) заведующий лабораторией математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах

(наименование подразделения)

Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького», рассмотрев статью Александрова Д.В., Асеева Д.Л., Малыгина А.П. «К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной» 39 страниц

(Ф.И.О. автора, вид, название материала, количество листов)

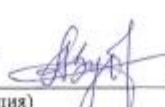
подтверждаю, что в материале не содержатся сведения, относящиеся к государственной тайне. Материал не патентоспособен и не содержит сведений конфиденциального характера и «ноу-хау».

На публикацию материалов не следует
(следует ли)

получить разрешение _____
(организация, данный пункт вводится при необходимости)

Закключение: это позволяет мне сделать заключение, что рассмотренный материал может быть опубликован в открытой печати и вывезен за границу для опубликования

Председатель комиссии (руководитель-эксперт)

Зав. лабораторией математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах  А.Ю. Зубарев
(должность, подпись, инициалы и фамилия)

Главный специалист ОНТИ УНИ  Н.П. Невраева
(подпись)

Начальник Первого отдела  А.Г. Гришин
(подпись)



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
ГОУ ВПО «УрГУ»

А.О. Иванов
(подпись)

08 2011 г.

**Экспертное заключение
о возможности опубликования**

Я, председатель экспертной комиссии (или руководитель-эксперт)

математико-механического факультета

(наименование подразделения)

Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького», рассмотрев статью Иванова А.А., Малыгина А.П., «Нелинейные эффекты при направленной кристаллизации трехкомпонентных расплавов с образованием двухфазных зон», 37 страниц

(Ф.И.О. автора, вид, название материала, количество листов)

подтверждаю, что в материале не содержатся сведения, относящиеся к государственной тайне. Материал не патентоспособен и не содержит сведений конфиденциального характера и «ноу-хау».

На публикацию материалов не следует
(следует ли)

получить разрешение _____
(организации, данный пункт вводится при необходимости)

Заключение: это позволяет мне сделать заключение, что рассмотренный материал может быть опубликован в открытой печати и вывезен за границу для опубликования

Председатель комиссии (руководитель-эксперт)
Декан математико-механического факультета М.О. Асанов
(должность, подпись, инициалы и фамилия)

Главный специалист ОНТИ УНИ Н.П. Невраева
(подпись)

Начальник Первого отдела А.Г. Гришин
(подпись)

ВЛИЯНИЕ КОНВЕКЦИИ, АНИЗОТРОПИИ И НЕОДНОРОДНОСТИ СРЕДЫ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ПРОЦЕССАХ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

© 2010 г. Д. В. Александров, А. П. Малыгин

Представлено академиком Н.А. Виталиным 24.03.2010 г.

Поступило 09.04.2010 г.

Систематическое изучение фазовых превращений в системах жидкость–твердая фаза берет начало с конца XIX века с классических работ Стефана. В своих исследованиях Стефан использовал модель процесса, учитывающую перенос тепла и движение плоской границы раздела фаз–фронта кристаллизации. Предположение о существовании в системе четко выраженной границы фазового перехода выполняется далеко не всегда. Так, накопление примеси перед фронтом затвердевания, связанное с ее вытеснением при росте твердой фазы, приводит к возникновению перед границей жидкость–твердая фаза концентрационного переохлаждения [1]. Описание процесса затвердевания в последующие моменты времени с помощью фронтальной модели уже не применимо, поскольку появление переохлаждения создает преимущественные условия для роста выступов твердой фазы в глубь расплава и развития неустойчивости [2, 3]. Таким образом, перед фронтом появляется область смешанного фазового состояния, в которой претерпевают рост элементы твердого вещества. Если это происходит достаточно интенсивно, то концентрационное переохлаждение может быть практически полностью скомпенсировано выделяющейся скрытой теплотой фазового превращения. Такая двухфазная зона получила название квазиравновесной [4]. Далее процесс затвердевания протекает при наличии протяженной области фазового перехода, имеющей две подвижные границы.

При экспериментах было замечено (см., например, работы [5, 6]), что при достижении двухфазной зоной некоторой критической толщины h_c концентрация примеси в жидкой части системы существенно возрастает. Это обеспечивается притоком примеси из каналов, образующихся в двухфазной зоне (под каналами понимают свободные от твердой фазы протоки в двухфазной зоне, заполненные жидкостью). Такие каналы на-

блюдаются в процессах затвердевания, вызванных охлаждением системы сверху или снизу. Так, например, в первом случае при накоплении примеси в жидкой фазе области фазового превращения увеличивается плотность жидкости, что приводит к возникновению конвективного течения в сторону расположенного ниже раствора или расплава [7]. При этом, чем ниже температура на границе охлаждения, тем толще слой h_c и больше примеси выбрасывается конвективными струями в жидкость из каналов двухфазной зоны. Вытесненная таким образом масса замещается потоком жидкости, идущим в двухфазную область из раствора или расплава. Эта жидкость, протекая по двухфазной зоне, частично замерзает, уменьшая проницаемость зоны, и выделяет дополнительную скрытую теплоту, замедляющую скорость кристаллизации. Указанный механизм приводит к возникновению замкнутых линий тока, характеризующих конвективные течения жидкости в каналах [7, 8]. В качестве причины образования каналов можно назвать неустойчивость однородного роста и локальную анизотропию области фазового превращения. В работе [8] предложена простейшая модель, демонстрирующая механизм возникновения такой неустойчивости, без учета распределения доли твердой фазы и диффузионных процессов, которые являются главной причиной образования самой двухфазной зоны. Ниже показано, что учет конвективно-диффузионных процессов, сопровождающих фазовый переход, приводит к значительному (в разы) увеличению области параметров системы, отвечающей неустойчивому режиму.

Отметим, что согласно экспериментальным данным количество возникающих в двухфазной зоне каналов может быть от одного канала на весь слиток [5] до целой сети каналов, отстоящих друг от друга на расстоянии порядка 1 см [7]. Образование указанных каналов (см., например, фотографии в работах [5–8]) конвективного течения жидкости является весьма распространенным явлением. Так, при затвердевании сплавов их присутствие приводит к неоднородностям примесного распре-

Уральский государственный университет
им. А.М. Горького, Екатеринбург

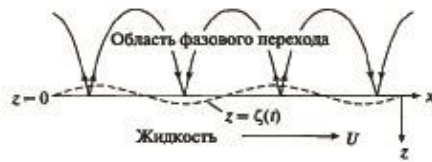


Рис. 1. Схематическая диаграмма процесса. Течение в каналах области фазового перехода изображено стрелками.

деления [9], при замерзании льда они замедляют скорость его прироста [6], при кристаллизации магмы они влияют на отложения минералов [10]. Возможно, что они встречаются также на границе внутреннего и внешнего ядра Земли [11].

Течение жидкости в каналах двухфазной зоны будем описывать с помощью уравнения Дарси для пористой среды

$$\mu u = \Pi(\rho, g - \nabla p), \quad (1)$$

где u — скорость жидкости, p — давление, μ — коэффициент динамической вязкости, ρ — плотность жидкости, g — ускорение свободного падения, $\Pi = \Pi(\varphi)$ — тензор проницаемости двухфазной зоны, зависящий от доли твердой фазы φ . Проницаемости в горизонтальном (Π_h) и вертикальном (Π_v) направлениях связаны посредством коэффициента анизотропии $0 \leq \beta \leq 1$: $\Pi_h = \beta^2 \Pi_v$ [8]. Изменение проницаемости с глубиной двухфазного слоя связано с наличием температурного градиента. Следуя работе [8], будем моделировать такую зависимость следующим образом:

$$\Pi_v(z) = \Pi_v(0) \exp(\gamma z), \quad \Pi_h(z) = \beta^2 \Pi_v(z), \quad (2)$$

где γ — параметр неоднородности.

Процессы тепло- и массопереноса в двухфазной зоне будем описывать с помощью конвективных уравнений теплопроводности, диффузии и уравнения ликвидус, следующего из фазовой диаграммы:

$$\rho_m c_m \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_l c_l u \nabla T = \nabla(k_m \nabla T) + \rho_l L \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (3)$$

$$(1 - \varphi) \frac{\partial C}{\partial t} + u \nabla C = \nabla(D_m \nabla C) + (1 - k) C \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (4)$$

$$T = T_* - mC, \quad (5)$$

где T — температура, C — концентрация примеси, L — скрытая теплота кристаллизации, k — коэффициент распределения примеси, m — коэффициент наклона линии ликвидус, T_* — температура фазового перехода чистого вещества, ρ — плотность твердой фазы, ρ_m , c_m , k_m и D_m — плотность, теплоемкость, теплопроводность и коэффициент диффузии примеси, зависящие от доли твердой фазы φ . Коэффициенты переноса в двухфазной

зоне определяются через коэффициенты переноса в твердой и жидкой фазах согласно правилу смесей [12]

$$\rho_m c_m = \rho_l c_l (1 - \varphi) + \rho_s c_s \varphi, \quad (6)$$

$$k_m = k_l (1 - \varphi) + k_s \varphi, \quad D_m = D_l (1 - \varphi),$$

где индексы s и l обозначают соответствующие величины, определенные для твердого и жидкого состояния.

На границе области фазового перехода и жидкости выполняются условия баланса тепла и массы:

$$\rho_l L \varphi_s V = k_m(\varphi_s) \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_s - k_l \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_s, \quad (7)$$

$$(1 - k) C_s \varphi_s V = D_m(\varphi_s) \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_s - D_l \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_s, \quad (8)$$

где V — скорость движения межфазной границы, а индекс b обозначает соответствующую величину на границе.

Течение жидкости со скоростью U (рис. 1) возмущает межфазную границу из положения $z = 0$, соответствующего равновесию, в некоторое новое положение $z = \zeta(x, t) = \zeta \exp(i\alpha x + \sigma t)$. Здесь ζ — амплитуда возмущений, α и σ — волновое число и параметр скорости роста возмущений (параметр неустойчивости), i — мнимая единица. Будем считать, что движение жидкости безвихревое, тогда потенциал скорости удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta \Phi = 0$ ($u = \nabla \Phi$). Пренебрегая скоростью течения жидкости в двухфазной зоне по сравнению со скоростью течения жидкости в области $z > 0$, на межфазной границе имеем пограничное условие непротекания жидкости. С учетом этого потенциал скорости в жидкости принимает вид

$$\Phi = Ux - iU\zeta \exp(-\alpha z). \quad (9)$$

Давление на межфазной границе, определяющее течение в каналах двухфазной области, находится из уравнения Бернулли с помощью (9) и имеет вид

$$p = -\rho_l \alpha U^2 \zeta. \quad (10)$$

Принимая во внимание уравнение неразрывности $\nabla u = 0$ для потока жидкости в каналах (здесь мы считаем малыми изменения доли твердой фазы в двухфазной зоне вследствие активной циркуляции жидкости в области, занимаемой каналами), из уравнений (1) и (2) получаем уравнение для определения давления в зоне фазового перехода

$$\beta^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \gamma \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0,$$

решение которого имеет вид

$$p = -\rho_l \alpha U^2 \zeta \exp(qz), \quad q = \frac{\gamma}{2} + \frac{\sqrt{\gamma^2 + 4\alpha^2 \beta^2}}{2}. \quad (11)$$

Отметим, что на поверхности $z = 0$ выражение (11) переходит в (10). Для простоты изложения здесь мы пренебрегаем действием силы тяжести и охватываем ситуации охлаждения сверху и снизу.

Поскольку время релаксации температурного поля намного меньше всех остальных характерных времен процесса, температуру в зоне фазового превращения можно считать линейной функцией пространственной координаты z :

$$T(x, z, t) = T_b + Gz + \hat{\theta}(z) \exp(i\alpha x + \sigma t)$$

(при этом концентрация примеси определяется уравнением (5)), где T_b — температура на межфазной границе, G — температурный градиент. Амплитуда возмущений температуры $\hat{\theta}$ находится из системы уравнений (3)–(5) с учетом выражения (11), зависимостей коэффициентов переноса от доли твердой фазы ϕ (выражения (6)) и ее возмущений

$$\phi(x, z, t) = \phi_0(x, z) + \Phi(z) \exp(i\alpha x + \sigma t).$$

Здесь ϕ_0 и Φ — невозмущенное значение и амплитуда возмущений доли твердой фазы. Принимая во внимание квазистационарное приближение ($\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow 0$, его применимость показана в работе [13])

и исключая из системы (3)–(5) группу слагаемых, содержащих ϕ_0 , получаем следующее уравнение:

$$\frac{d^2 \hat{\theta}}{dz^2} - \alpha^2 \hat{\theta}(z) = A \exp(\gamma + q)z, \quad (12)$$

$$A = \left(1 + \frac{\kappa(K-1)}{KD_1}\right) \frac{\Pi_s(0)\alpha U^2 q G \zeta_1^2}{\kappa v},$$

где $\kappa = \frac{k_2}{\rho_2 c_2}$, $K = \frac{k_1}{k_2}$, $v = \frac{\mu}{\rho_1}$ — кинематическая вязкость.

Учитывая ограниченность $\hat{\theta}$ при $z \rightarrow -\infty$ и граничное условие $\hat{\theta}(0) = -G\zeta_1^2$, следующее из температурного распределения, находим решение уравнения (12) при $\beta \neq 1$ и $\gamma \neq 0$

$$\hat{\theta}(z) = -G\zeta_1^2 \exp(\alpha z) + \frac{A}{(q + \gamma)^2 - \alpha^2} [\exp((q + \gamma)z) - \exp(\alpha z)]. \quad (13)$$

В случае изотропной ($\beta = 1$) и однородной ($\gamma = 0$) структуры области фазового перехода решение записывается в виде

$$\hat{\theta}(z) = -G\zeta_1^2 \exp(\alpha z) + \frac{A}{2\alpha} z \exp(\alpha z). \quad (14)$$

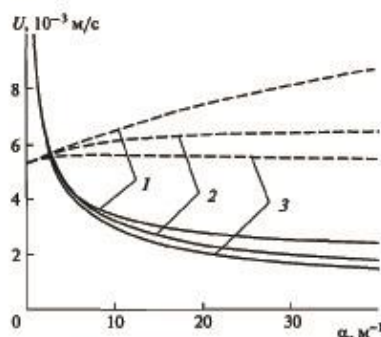


Рис. 2. Влияние параметра анизотропии на кривые нейтральной устойчивости: $\beta = 0.1$ (1), 0.5 (2), 1 (3). Области неустойчивости и устойчивости находятся выше и ниже соответствующих кривых. Сплошные линии построены на основе соотношений (16), штриховые — на основе упрощенной модели [8]. Параметры раствора [8]: $v = 1.07 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $\kappa = 1.33 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$, $D_1 = 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, $V = 10^{-6} \text{ м/с}$, $\Pi_s(0) = 10^{-6} \text{ м}^2$, $K = 3.8$, $k = 0$, $\gamma = 10 \text{ м}^{-1}$.

Исключая из граничных условий (7) и (8) долю ϕ_s с использованием выражений (5) и (6), на межфазной границе имеем следующее условие:

$$\rho_s L V = k_2 \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_s + \frac{(1-k)k_1(T_s - T_\infty)V}{D_1}. \quad (15)$$

При выводе этого соотношения было использовано условие маргинального равновесия на межфазной границе со стороны жидкости [14]:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_s = -\frac{1}{m} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_s.$$

Далее, возмущая выражение (15) в окрестности положения равновесия $z = 0$, подставляя соотношения (13) и (14), находим параметр эволюции возмущений

$$\sigma = \alpha V \left(\frac{A_1}{q + \gamma + \alpha} - 1 \right) - \frac{(1-k)V^2}{KD_1} \quad \text{при } \beta \neq 1, \gamma \neq 0, \quad (16)$$

$$\sigma = \alpha V \left(\frac{A_1}{2\alpha} - 1 \right) - \frac{(1-k)V^2}{KD_1} \quad \text{при } \beta = 1, \gamma = 0,$$

$$A_1 = \frac{A}{\alpha G \zeta_1^2}, \quad V = \frac{k_2 G}{\rho_1 L - (1-k)k_1(T_s - T_\infty)/D_1}.$$

Знак параметра σ определяет области устойчивости ($\sigma < 0$) и неустойчивости ($\sigma > 0$) процесса. На рис. 2 и 3 изображены кривые нейтральной устойчивости ($\sigma = 0$) при различных значениях параметров анизотропии и неоднородности. Для

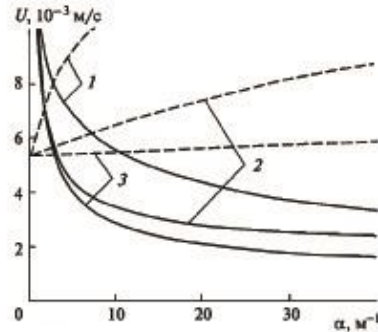


Рис. 3. Влияние параметра неоднородности на кривые нейтральной устойчивости: $\gamma = 1$ (1), 10 (2), 100 м^{-1} (3). Области неустойчивости и устойчивости находятся выше и ниже соответствующих кривых. Сплошные линии построены на основе соотношений (16), штриховые — на основе упрощенной модели [8], $\beta = 0.1$.

сравнения на рисунках построены соответствующие зависимости по данным теории, развитой в работе [8], где рассмотрена упрощенная модель без учета влияния примеси, без учета зависимости коэффициентов переноса от доли твердой фазы и без учета ее возмущений (пределный переход $D_1 \rightarrow \infty$ дает критерий неустойчивости работы [8]). Построенные графики показывают, что учет этих факторов существенно расширяет области неустойчивости (более чем в два раза для расчетных волновых чисел). Это, в частности, объясняется тем, что вытесняемая твердой фазой примесь повышает концентрацию и понижает температуру фазового перехода отдельных участков жидкости, а это приводит к увеличению неоднородности структурно-фазового состава. При этом уменьшение параметра анизотропии (рис. 2) расширяет область устойчивости вследствие ослабления конвективного переноса в области фазового превращения, а увеличение параметра неоднородности (рис. 3) расширяет область неустойчивости вследствие интенсификации процессов тепло- и массопереноса в этой области. Выражение (16) позволяет оценить скорость роста неровностей (шероховатостей) межфазной границы, приводящей к турбулизации жидкости в слос, прилегающем к поверхности $z = 0$. Оценивая параметр σ по порядку величины как $(10^{-5} - 10^{-4}) \text{ с}^{-1}$, находим, что амплитуда неровности в 1 см может возрасти в разы за несколько часов. Для определения размеров структур возникающих неоднородностей необходим расчет амплитуд возмущений, который может быть проведен с помощью нелинейного анализа неустойчивости. Такое исследова-

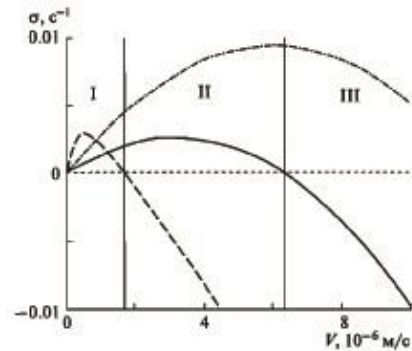


Рис. 4. Зависимость параметра неустойчивости от скорости кристаллизации. Сплошная и штрихпунктирная линии построены по формуле (16) при $\alpha = 10 \text{ м}^{-1}$, $\beta = 0.5$, $\gamma = 10 \text{ м}^{-1}$, $U = 8 \cdot 10^{-3} \text{ м/с}$ и $U = 11 \times 10^{-3} \text{ м/с}$ соответственно. Пунктирная линия построена по формуле (38) из работы [15] (масштаб σ увеличен в 1000 раз). Точки пересечения кривых с горизонтальной линией показывают переход через кривую нейтральной устойчивости. Вертикальные линии разграничивают три области процесса: I — динамическая и конвективная неустойчивость, II — динамическая и конвективная неустойчивость, III — динамическая и конвективная неустойчивость.

ние, позволяющее изучать процесс вблизи кривой нейтральной устойчивости, может быть проведено в духе работы [3].

Поскольку двухфазная область появляется как результат концентрационного переохлаждения и развития морфологической неустойчивости плоского фронта, описанной в классической работе [2], при отсутствии конвекции в процессе возможна лишь динамическая неустойчивость, состоящая в осцилляциях двухфазной зоны как целой с нулевым волновым числом. Устойчивость области фазового перехода по отношению к таким колебаниям, являющимся наиболее опасными (быстрорастущими), была исследована ранее в работе [15]. На рис. 4 показано, что конвективная неустойчивость продлевает область динамической неустойчивости (сплошная линия расширяет область динамической неустойчивости I до области конвективной неустойчивости I и II, определяемой сплошной кривой). При этом при увеличении скорости конвективного потока область неустойчивости становится существенно шире (сплошная и штрихпунктирная кривые на рис. 4). Поскольку в реальных процессах фазовый переход протекает почти всегда в протяженной области и при наличии конвективных течений жидкости, главным результатом исследования

является новый критерий конвективной неустойчивости процесса.

Работа выполнена при финансовой поддержке Федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009–2013 годы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иванцов Г.П. // ДАН. 1951. Т. 81. № 2. С. 179–182.
2. Mullins W.W., Sekerka R.F. // J. Appl. Phys. 1964. V. 35. P. 444–451.
3. Wollkind D.J., Segel L.A. // Phil. Trans. Roy. Soc. London. A. 1970. V. 268. P. 351–380.
4. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. // Quart. J. Mech. and Appl. Math. 1983. V. 36. P. 505–539.
5. Bergman M.J., Fearn D.R., Bloxham J., Shannon M.C. // Metal. Trans. A. 1997. V. 28. P. 859–866.
6. Wettlaufer J.S., Worster M.G., Huppert H.E. // Geophys. Res. Lett. 1997. V. 24. P. 1251–1254.
7. Wettlaufer J.S., Worster M.G., Huppert H.E. // J. Fluid Mech. 1997. V. 344. P. 291–316.
8. Feltham D.L., Worster M.G., Wettlaufer J.S. // Geophys. Res. Lett. 2002. V. 107. P. 3009.
9. Hellowell A., Sarazin J.R., Steube R.S. // Phil. Trans. Roy. Soc. London. A. 1993. V. 345. P. 507–544.
10. Tait S., Jaupart C. // J. Geophys. Res. 1992. V. 97. P. 6735–6756.
11. Bergman M.J., Fearn D.R. // Geophys. Res. Lett. 1994. V. 21. P. 477–480.
12. Batchelor G.K. // Ann. Rev. Fluid Mech. 1974. V. 6. P. 227–255.
13. Feltham D.L., Worster M.G. // J. Fluid Mech. 1999. V. 391. P. 337–357.
14. Worster M.G. // J. Fluid Mech. 1986. V. 167. P. 481–501.
15. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. // J. Cryst. Growth. 2000. V. 210. P. 797–810.

FLUID MECHANICS RESEARCH

Vol. 37

No. 1

2010

CONTENTS

- 1 Solidification from a Cooled Boundary with a Mushy Layer Under Conditions of Nonturbulent and Turbulent Heat and Mass Transfer in the Ocean
D. V. Alexandrov, I. G. Nizovtseva, D. Lee, and H.-N. Huang
- 15 Variable Permeability Effect on Vortex Instability of Non-Darcian Mixed Convection Flow Over a Horizontal Permeable Surface Embedded in a Saturated Porous Medium
A. M. Elaiw, F. S. Ibrahim, A. A. Bakr, and Rama Subba Reddy Gorla
- 31 The Onset of Heat Transfer in Multiple Layers
Salah A. El-Kholy and Rama Subba Reddy Gorla
- 42 Hydrodynamic Channel Flow Modeling Using Combined Large Eddy Simulation and Wall Functions
Mehdi Adjami, Mehdi Shafieefar, and Ali Akbar Salehi Neyshabouri
- 70 Soret and Dufour Effects on Free Convection Heat and Mass Transfer Along a Horizontal Plate in Non-Darcy Porous Medium
P. V. S. N. Murthy and P. A. Lakshmi Narayana
- 85 Numerical Prediction of Non-Isothermal Flow Through a Curved Square Duct
Rabindra Nath Mondal, Md. Sharif Uddin, and Shinichiro Yanase

Solidification from a Cooled Boundary with a Mushy Layer Under Conditions of Nonturbulent and Turbulent Heat and Mass Transfer in the Ocean¹

D. V. Alexandrov¹, I. G. Nizovtseva¹, D. Lee², and H.-N. Huang²

¹Department of Mathematical Physics, Urals State University,
Ekaterinburg 620083, Russian Federation
E-mail: dmitri.alexandrov@usu.ru

²Department of Mathematics, Tunghai University
Taichung, 407, Taiwan

We present new analytic results relating to the nonstationary Stefan-type problems for the unidirectional solidification of binary solutions with a mushy layer under conditions of nonturbulent and turbulent heat and mass transfer in the liquid phase. Explicit analytical solutions (thickness of mushy layer and growth rates of its boundaries, temperature and salinity distributions, solid phase fraction) of the nonlinear model under consideration are found. Model predictions are in good agreement with existing experimental data.

* * *

Nomenclature

a	solid phase – mushy layer boundary [m];
a_w	thermal diffusivity of water [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$];
$a(0)$	a at $t = 0$ [m];
b	mushy layer – liquid phase boundary [m];
$b(0)$	b at $t = 0$ [m];
c_i	specific heat of the solid phase (ice) [$\text{W} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ \text{C}^{-1}$];
c_m	specific heat of the mushy layer [$\text{W} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ \text{C}^{-1}$];
c_w	specific heat of the liquid phase (water) [$\text{W} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ \text{C}^{-1}$];
C_1	temperature gradient, Eq. (1) [$^\circ \text{C} \cdot \text{m}^{-1}$];
D_w	diffusion coefficient of water [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$];
f_1	function, Eq. (17);
f_2	function, Eq. (17);
f_3	function, Eq. (39);

¹Received 19.09.2008

1

ISSN 1064-2277

© 2010 Begell House, Inc.

f_4	function, Eq. (39);
F_1	function, Eq. (23);
F_1	function, Eq. (24);
k_i	thermal conductivity of the solid phase (ice), $[W \cdot s \cdot m^{-1} \cdot ^\circ C^{-1}]$;
k_m	thermal conductivity of the mushy layer $[W \cdot s \cdot m^{-1} \cdot ^\circ C^{-1}]$;
k_w	thermal conductivity of the liquid phase (water) $[W \cdot s \cdot m^{-1} \cdot ^\circ C^{-1}]$;
L_V	latent heat $[W \cdot s \cdot m^{-3}]$;
m	liquidus slope $[^\circ C \cdot psu^{-1}]$;
S_b	salinity at the boundary between mushy layer and liquid phase [psu];
S_m	salinity distribution in the mushy layer [psu];
S_w	salinity distribution in the liquid phase (water), [psu];
S_∞	salinity far from phase transition boundaries in the liquid phase (ocean) [psu];
t	time [s];
T_1	temperature, Eq. (2) $[^\circ C]$;
T_2	temperature gradient, Eq. (2) $[^\circ C \cdot m^{-1}]$;
T_b	temperature at the boundary between mushy layer and liquid phase $[^\circ C]$;
T_c	temperature, Eq. (18) $[^\circ C]$;
T_i	temperature distribution in the solid phase (ice) $[^\circ C]$;
T_m	temperature distribution in the mushy layer $[^\circ C]$;
T_w	temperature distribution in the liquid phase (water) $[^\circ C]$;
T_∞	temperature far from phase transition boundaries in the liquid phase (ocean) $[^\circ C]$;
T_0	temperature at the solid wall (atmosphere-sea ice boundary) $[^\circ C]$;
u	friction velocity $[m \cdot s^{-1}]$;
z	spatial coordinate [m].

Greek symbols

α_h	turbulent transfer coefficient for heat;
α_s	turbulent transfer coefficient for salt;
ρ_i	density of the solid phase (ice) $[kg \cdot m^{-3}]$;
ρ_m	density of the mushy layer $[kg \cdot m^{-3}]$;
ρ_w	density of the liquid phase (water) $[kg \cdot m^{-3}]$;
φ	solid fraction;
φ_a	solid fraction at the boundary between solid phase and mushy layer;
φ_b	solid fraction at the boundary between mushy layer and liquid phase.

Subscripts

a	solid phase-mushy layer boundary;
b	mushy layer-liquid phase boundary;
i	solid (ice);
m	mush;
w	liquid (water).

Introduction

The seemingly trivial problem of the growth of a solid phase from a cooled boundary comes under the rubric of so-called Stefan problems describing a wide range of physical processes (Meirmanov, [22]). Their rich nonlinear behavior has attracted substantial scientific interest and their

ubiquity in fields ranging from geophysics to metallurgy stimulates developing new mathematical models and approaches. Solidification of binary solutions and melts is rather frequently accompanied by the appearance of supercooled regions, i.e., regions in the liquid phase, the temperature of which is lower than the equilibrium temperature, which depends on the local salinity (impurity concentration).

There exist two principal mechanisms of the appearance of the above regions. The first mechanism involves the fact that, upon arranging, in a certain manner, for rather high-rate removal of heat from the outer surface, when the dimensions of the space occupied by the melt in the direction of motion of the phase interface is much greater than the transverse dimensions, thermal supercooling inevitably arises upstream of the front (see, among others, Avdonin [11] and Koyalo [20]). Another mechanism of supercooling of the solution was pointed out by Ivantsov [19] and has been termed constitutional supercooling, to distinguish it from thermal supercooling. The inception of this type of supercooling can be understood in the following manner. Let us assume that the impurity is initially distributed uniformly in the liquid phase, whereas the temperature gradients are such that the crystallization front moves into the liquid and the temperature of the melt is high than the temperature of phase transition. If the impurity distribution factor, equal to the ratio of concentration in the liquid and solid phase to both sides of the crystallization front is smaller than unity, then the movement of the phase interface will be accompanied by displacement of the impurity by the front and its removal to the liquid by the diffusion mechanism. Initially the diffusion fluxes are weak and hence the impurity will be accumulated directly upstream of the front. This will increase the temperature of phase transition in the melt with increasing distance from the phase interface (the phase transition temperature at the front itself drops according to the phase diagram). Finally, the stream of the displaced impurity at the front becomes equal to the diffusion flux. As a result there forms some distribution of the impurity, phase transition temperature and the temperature in the liquid. If the gradient in the liquid at the front is lower than the corresponding gradient of the phase transition temperature, then a supercooled region arises upstream of the front. This supercooling is known as constitutional supercooling and its existence was confirmed experimentally (see, for example, Borisov [13]). Elements of the new phase may start germinating in the supercooled zones in the form of dendrites or particles by means of bulk nucleation, which will in part promote desupercooling. One of the possible descriptions of the development of directional solidification was suggested by Borisov [13]. His theory of the quasiequilibrium mushy layer is based on the assumption that the nascent supercooling is instantaneously reduced by growing dendrites and there forms some structureless mushy layer, separating the solid and liquid phases. The scenario suggested by Borisov is described by nonlinear heat and mass transfer equations and boundary conditions imposed at moving boundaries (see, among others, Borisov [13], Hills et al. [17] Worster [31], Buyevich et al. [14]). Although general approaches for solving such problems are absent, some solidification scenarios were solved analytically (steady-state regime with special attention to thermodiffusion, temperature-dependent diffusivity and weak convection is described in refs. (Fowler [16], Alexandrov [2], Alexandrov [3], Alexandrov and Aseev [4], Aseev and Alexandrov [10]), self-similar process existing only at a constant temperature of a cooled boundary and characterizing, as a rule, late solidification stages is described in refs. (Worster [31], Alexandrov and Malygin [5]) and essentially nonstationary process containing a free parameter with arbitrary fluctuations of the atmospheric temperature and constant temperature in the isothermal ocean is described in refs. (Alexandrov et al. [5], Alexandrov and Malygin [8], Alexandrov et al. [9]).

As indicated below, the present study considerably extends the range of the theory's application. Note, in the first place, physical hypotheses used in our theory. Let us consider the case when the temperature field in the solid material and mushy layer is practically linear function of the spatial

coordinate. This assumption is frequently realized in geophysics (e. g., freezing of leads (Morison et al. [23], Wettlaufer et al. [30]) and formation of "false" bottoms (Martin and Kauffman [21]) and metallurgy (e. g., solidification of alloys in ingot molds (Buyevich et al. [14], Alexandrov et al. [11]). The latter stems from the fact that a relaxation time of the temperature field is essentially less than a characteristic time of the front motion. Another simplification lie in the fact that the solid phase-mushy layer interface lags highly behind the mushy layer-liquid boundary by virtue of the fact that the process of solid phase formation is hampered within the mushy layer with a high content of solid (all of the impurities rejected by the solid phase lattice are retained within the interstices of a layer of solid material). In this connection, one can treat the theory under consideration as generalization, in a certain sense, of existing analytical approaches to nonstationary Stefan-type problems describing the solidification of two-component systems with a mush.

1. Model of Mushy Layer Evolution for Nonturbulent Conditions

Let us now consider a full set of mushy layer equations and boundary conditions earlier derived and discussed by Hills et al. [17], Fowler [16] and Borisov [13]. The distinctive feature of our theory for nonturbulent heat and mass transfer in the liquid consists in analytical solutions of nonlinear model with a mushy layer at the indicated conditions.

Consider a semi-infinite region $z > 0$ filled with liquid which initially has uniform composition S_∞ and temperature T_∞ . The solid wall (e. g., the boundary between the atmosphere and the growing sea ice) $z = 0$ is maintained at temperature $T_0(t)$ which is an arbitrary function of time t . Regions $a(t) < z < b(t)$ and $z > b(t)$ represent the mushy layer and the liquid phase (e. g., sea water free of ice crystals) respectively. In accordance with the aforementioned assumption about the linear form of temperature in the solid phase and mushy layer (see, among others, experimental data in (Morison et al. [23], Wettlaufer et al. [30], Martin and Kauffman [21]), we have

$$T_1(z, t) = T_0(t) + C_1(t)z, \quad 0 < z < a(t), \quad (1)$$

$$T_m(z, t) = T_1(t) + T_2(t)z, \quad a(t) < z < b(t), \quad (2)$$

where $a(t)$ and $b(t)$ are the boundaries "solid phase – mushy layer" and "mushy layer – liquid phase" (generally speaking, both of which can be the phase transition interfaces). The linear temperature distribution (2) in the mushy layer must obey the heat transfer equation of the form

$$\rho_m(\varphi)c_m(\varphi)\frac{\partial T_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_m(\varphi)\frac{\partial T_m}{\partial z} \right) + L_V \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad a(t) < z < b(t). \quad (3)$$

The thermal properties of the mush can be assumed to be volume-fraction-weighted averages of the properties of the individual phases so that

$$k_m(\varphi) = k_s\varphi + k_w(1 - \varphi), \quad \rho_m(\varphi)c_m(\varphi) = \rho_s c_s \varphi + \rho_w c_w(1 - \varphi). \quad (4)$$

The validity of these expressions was discussed from the theoretical point of view (Batchelor [12], Buyevich and Alexandrov [15]) and confirmed by a number of experiments (see, among others, Perovich and Gow [29]).

Eq. (3) will be satisfied by the linear expression Eq. (2) not only if the time of significant extension of the zone is much greater than the relaxation time of the temperature field, but also if variations in the solid phase fraction are small enough (the latter statement agrees with the obtained solution and was discussed previously by Alexandrov et al. [5], Alexandrov and Malygin [8], Alexandrov et al. [9]).

Local conservation of solute can be expressed in differential form as

$$\frac{\partial}{\partial t} ((1 - \varphi) S_m) = D_w \frac{\partial}{\partial z} \left((1 - \varphi) \frac{\partial S_m}{\partial z} \right). \quad (5)$$

Considering the case of salt solutions similar to sea water, we put, for the sake of simplicity, the impurity distribution factor into zero.

The temperature and salinity fields within the mushy layer are connected by the liquidus line equation

$$T_m(z, t) = -m S_m(z, t), \quad (6)$$

where m is the liquidus slope determined from the phase diagram.

Boundary conditions imposed at two moving boundaries $a(t)$ and $b(t)$ have the form (see, among others, Worster [31], Buyevich et al. [14])

$$\varphi = \varphi_a, \quad T_i = T_m, \quad z = a(t), \quad (7)$$

$$L_V (1 - \varphi_a) \frac{da}{dt} = k_i \frac{\partial T_i}{\partial z} - k_m(\varphi_a) \frac{\partial T_m}{\partial z}, \quad z = a(t), \quad (8)$$

$$S_m(1 - \varphi_a) \frac{da}{dt} = -D_w(1 - \varphi_a) \frac{\partial S_m}{\partial z}, \quad z = a(t), \quad (9)$$

$$\varphi = \varphi_b, \quad T_m = T_b, \quad z = b(t), \quad (10)$$

$$L_V \varphi_b \frac{db}{dt} = k_m(\varphi_b) \frac{\partial T_m}{\partial z} - k_w \frac{\partial T_w}{\partial z}, \quad z = b(t), \quad (11)$$

$$S_b \varphi_b \frac{db}{dt} = D_w(1 - \varphi_b) \frac{\partial S_m}{\partial z} - D_w \frac{\partial S_w}{\partial z}, \quad z = b(t), \quad (12)$$

$$\frac{\partial T_w}{\partial z} = -m \frac{\partial S_w}{\partial z}, \quad z = b(t). \quad (13)$$

Note that conditions Eqs. (7) and (10) express continuity in temperature field, however, there is no reason for φ to be continuous even in our continuum model (Worster, 1986). Boundary conditions (8), (9) and (11), (12) are the expressions of heat and mass balances at the moving interfaces. Condition (13) ensures that none of the liquid region is supersaturated, and it is marginal in the sense that Eq. (13) gives the smallest temperature gradient consistent with complete equilibrium, see Worster [31].

The transport of heat and solute in the ocean is described by classical equations

$$\frac{\partial T_w}{\partial t} = \alpha_w \frac{\partial^2 T_w}{\partial z^2}, \quad \frac{\partial S_w}{\partial t} = D_w \frac{\partial^2 S_w}{\partial z^2}, \quad z > b(t), \quad (14)$$

where $\alpha_w = k_w / (\rho_w c_w)$.

2. Analytical Solutions for Nonturbulent Conditions

Solutions of Eqs. (14) can be approximated by the following distributions in the case of small deviations of $b(t)$ from the square root dependence which, strictly speaking, can be induced by arbitrary time oscillations of temperatures $T_b(t)$, $T_\infty(t)$ and salinity $S_\infty(t)$

$$T_w(z, t) = T_\infty + \frac{(T_b - T_\infty) \operatorname{erfc}(z/\sqrt{4a_w t})}{\operatorname{erfc}(b(t)/\sqrt{4a_w t})}, \quad (15)$$

$$S_w(z, t) = S_\infty + \frac{(S_b - S_\infty) \operatorname{erfc}(z/\sqrt{4D_w t})}{\operatorname{erfc}(b(t)/\sqrt{4D_w t})}, \quad (16)$$

where $S_b = -T_b/m$ and temperature T_b at interface $b(t)$ can be found by substitution of distributions (14) and (15) to Eq. (13) as a function of coordinate b and time t :

$$T_b = \frac{T_\infty f_1 + m S_\infty f_2}{f_1 - f_2}, \quad (17)$$

$$f_1 = \sqrt{\frac{D_w}{a_w}} \exp\left(-\frac{b^2(t)}{4a_w t}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{b(t)}{\sqrt{4D_w t}}\right),$$

$$f_2 = \exp\left(-\frac{b^2(t)}{4D_w t}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{b(t)}{\sqrt{4a_w t}}\right).$$

In order to integrate the diffusion equation (5) let us express $T_2(t)\partial\varphi/\partial z$ from Eq. (3). With this aim in mind the left-hand side of Eq. (3) can be neglected because the temperature conductivities are several orders of magnitude high than the solute diffusivity so that the concentration relaxation time exceeds greatly the temperature one. Taking into account the latter we have from Eqs. (2) and (3)

$$T_2(t) \frac{\partial\varphi}{\partial z} = -\frac{L_V}{k_i - k_w} \frac{\partial\varphi}{\partial t}.$$

Now, substitution of this expression and distribution equation (2) into Eq. (5) makes possible the integration of the nonlinear diffusion equation in the mushy layer. The final result can be written in the form

$$\varphi(z, t) = \frac{T_m(z, t) - T_b + (T_b + T_c)\varphi_b}{T_m(z, t) + T_c}, \quad T_c = \frac{D_w L_V}{k_i - k_w}, \quad (18)$$

where $T_b(1 - \varphi_b) - T_c\varphi_b$ has only a weak dependence on time t . Substituting $z = a(t)$ into Eq. (18) we get the solid fraction at the phase transition boundary $a(t)$

$$\varphi_a = \frac{T_1 + aT_2 - T_b + (T_b + T_c)\varphi_b}{T_1 + aT_2 + T_c}. \quad (19)$$

Substitution of Eqs. (1), (2) and (6) to Eqs. (7), (9) and (10) gives the following expressions for coefficients $T_1(t)$, $T_2(t)$ and $C_1(t)$:

$$T_1(t) = T_b(t) - b(t)T_2(t), \quad T_2(t) = -T_b(t) \frac{da}{dt} \left(D_w + (a(t) - b(t) \frac{da}{dt}) \right)^{-1}, \quad (20)$$

$$C_1(t) = \frac{(a(t) - b(t))T_2(t) + T_b(t) - T_0(t)}{a(t)}. \quad (21)$$

Now taking into account Eqs. (20) and (21) in the boundary conditions (8), (11) and (12), we come to three conditions for the determination of two boundaries $a(t)$, $b(t)$ and φ_b of the form

$$L_V(1 - \varphi_a)a \frac{da}{dt} = k_l(T_b - T_0) + T_b \frac{da}{dt} \frac{(k_l \varphi_a + k_w(1 - \varphi_a))a - k_l(a - b)}{D_w + (a - b)da/dt}, \quad (22)$$

$$L_V \varphi_b \frac{db}{dt} = - \frac{k_l \varphi_b + k_w(1 - \varphi_b)}{D_w + (a - b)da/dt} T_b \frac{da}{dt} - k_w(T_b - T_\infty)F_1(b, t), \quad (23)$$

$$T_b \varphi_b \frac{db}{dt} = - \frac{D_w(1 - \varphi_b)}{D_w + (a - b)da/dt} T_b \frac{da}{dt} - D_w(T_b + mS_\infty)F_2(b, t), \quad (24)$$

where

$$F_1 = - \frac{2}{\sqrt{4\pi a_w t}} \frac{\exp[-b^2/(4a_w t)]}{\operatorname{erfc}[b/\sqrt{4a_w t}]}, \quad F_2 = - \frac{2}{\sqrt{4\pi D_w t}} \frac{\exp[-b^2/(4D_w t)]}{\operatorname{erfc}[b/\sqrt{4D_w t}]},$$

Expression (23) can be rewritten as

$$\varphi_b = -k_w \frac{T_b da/dt + (T_b - T_\infty)F_1(D_w + (a - b)da/dt)}{L_V(D_w + (a - b)da/dt)db/dt + (k_l - k_w)T_b da/dt}. \quad (25)$$

Let us especially emphasize that the boundary conditions (23) and (24) become identical in the case of $\varphi_b = 0$. This situation corresponds to quiescent solidification conditions which are frequently realized in laboratory experiments (see, among others, Huppert and Worster [18]) when crystals of solid may grow with a needle-like shape (analytically this situation was described by Alexandrov and Malygin [7] for the self-similar regime of directional solidification). The opposite case ($\varphi_b \neq 0$) is frequently met in nature when heat and salt fluxes in the ocean are strongly influenced by turbulence (see, e. g., McPhee [25]). Nevertheless, let us consider two cases with $\varphi_b = 0$ and $\varphi_b \neq 0$ in the absence of turbulent fluxes.

Considering the case $\varphi_b = 0$, taking into account expression (17) and $f_1 F_2 = f_2 F_1$, from Eqs. (19) and (25) we have that

$$\varphi_a = \frac{T_b(b - a)da/dt}{(T_b + T_c)D_w + T_c(a - b)da/dt}, \quad (26)$$

$$\frac{da}{dt} = - \frac{(T_\infty + mS_\infty)D_w f_1 F_2}{T_\infty f_1 + mS_\infty f_2 + (T_\infty + mS_\infty)(a - b)f_1 F_2}. \quad (27)$$

Since all of the impurities rejected by the solid phase lattice are retained within the interstices of a layer of solid material, the solid phase-mushy layer interface lags highly behind (this boundary is practically frozen) the mushy layer-liquid boundary ($a \ll b$) and the process does not depend on boundary a . Taking into account the latter and expressions (22) and (26), we have

$$\frac{da}{dt} = \frac{(T_0 - T_b)D_w}{bT_0}. \quad (28)$$

Equating the left-hand sides of Eqs. (27) and (28), we arrive at the transcendental equation showing dynamics of interface $b(t)$

$$\frac{T_0 - T_b}{b(t)T_0} = - \frac{(T_\infty + mS_\infty)f_1 F_2}{T_\infty f_1 + mS_\infty f_2 - (T_\infty + mS_\infty)b f_1 F_2}, \quad (29)$$

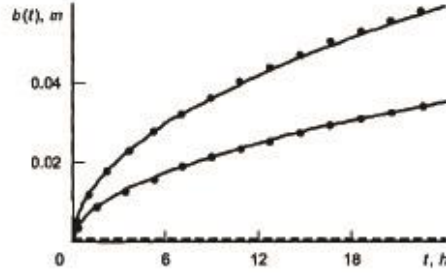


Fig. 1. Value of $b(t)$ in accordance with the theory under consideration (solid curves, Eq. (30)) and experimental data (black circles) with aqueous solutions of sodium nitrate (NaNO_3) reported by Huppert and Worster (1985) and Worster (1986). Dashed curve shows the calculated position of $a(t) \ll b(t)$.

whereas boundary $a(t)$ can be found by integration of Eq. (28). Here, $T_0 = T_0(t)$; $T_b = T_b(t, b(t))$; $f_1 = f_1(t, b(t))$; $f_2 = f_2(t, b(t))$; $F_1 = F_1(t, b(t))$; $F_2 = F_2(t, b(t))$; $T_\infty = T_\infty(t)$; $S_\infty = S_\infty(t)$.

Let us now consider possible case of crystal growth with $\varphi_b \neq 0$ for nonturbulent conditions. Again, taking into account $a \ll b$ and omitting a in Eq. (22) within the framework of the model that nothing depends on a , we get Eq. (28). Furthermore, expressing φ_b from Eqs. (23) and (24) and equating both of them, we come to rather intricate differential equation of the first order, which describes nonlinear dynamics of the phase transition interface $b(t)$. Omitting tedious mathematical manipulations, let us represent this equation in a standard form of the Cauchy problem

$$\frac{db}{dt} = \frac{D_w k_t [T_\infty f_1 + m S_\infty f_2 - T_0 (f_1 - f_2)]}{b(t) [D_w L_V (f_1 - f_2) - k_w (T_\infty f_1 + m S_\infty f_2)]}, \quad (30)$$

where $b(0)$ is a given parameter, and arguments of all functions, as before, depend on t and $b(t)$. Now, the phase transition boundary $a(t)$ can be easily found by integration of Eq. (28), and the solid fraction φ_a , after substitution of T_1 and T_2 from Eq. (20) to Eq. (19), can be represented as

$$\varphi_a(t) = \frac{T_b b (1 - \varphi_b) da/dt + (T_b + T_c) \varphi_b D_w - T_c \varphi_b b da/dt}{(T_b + T_c) D_w - T_c b da/dt}, \quad (31)$$

where $a(t) \ll b(t)$ is taken into account.

Thus, sufficiently general solution of the Stefan-type problem with two moving boundaries describing directional solidification in the presence of a mushy layer is completely constructed in the case of arbitrary time oscillations of external parameters such as atmospheric temperature or far-field temperature and salinity.

Fig. 1 demonstrates how the theory under consideration agrees with laboratory experiments upon that $\varphi_b = 0$. Apparently, this is due to the fact that laboratory experiments correspond to rather quiescent solidification conditions in the sense that tips of the crystals have a needle-like form in the absence of fluid flow in the liquid phase (ocean). Let us now turn our attention to natural conditions frequently met in geophysics of polar regions when a thin veneer of young ice moves downwards in a newly born cracks or leads under the influence of atmospheric temperature oscillations.

3. Model of Mushy Layer Evolution for Turbulent Conditions

In this case, the situation changes rather drastically because heat and salt fluxes in the ocean are strongly influenced by turbulence (see, among others McPhee [24], McPhee et al. [26], Notz et al. [27]). From the mathematical point of view the latter implies new boundary conditions imposed at the mushy layer - ocean interface. Replacing the molecular diffusive fluxes in the water (expressions (11) and (12)) with turbulent fluxes after Notz et al. [27], we come to

$$L_V \phi_b \frac{db}{dt} = k_m(\phi_b) \frac{\partial T_m}{\partial z} - \alpha_h \rho_w c_w u (T_\infty - T_b), \quad z = b(t), \quad (32)$$

$$S_b \phi_b \frac{db}{dt} = D_w(1 - \phi_b) \frac{\partial S_m}{\partial z} - \alpha_s u (S_\infty - S_b), \quad z = b(t). \quad (33)$$

The ratio of exchange coefficients α_h/α_s depends on the molecular diffusivities for heat (a_w) and salt (D_w) at that $\alpha_h/\alpha_s = (a_w/D_w)^n$ (McPhee [25]) with $2/3 < n < 4/5$ (Owen and Thomson [28], Yaglom and Kader [31]). The remaining equations and boundary conditions (1)–(10) hold true as before while Eq. (13), strictly speaking, becomes untrue because there is no a physical reason of proportionality between the temperature and salinity gradients due to the effect of turbulence. The aforementioned model [Eqs. (1)–(10), (32) and (33)] represents a nonlinear set of equations and boundary conditions for turbulent mixing in the ocean.

4. Analytical Solutions for Turbulent Conditions

The possibility of two scenarios with $\phi_b = 0$ and $\phi_b \neq 0$ is already discussed above. Although the second case of them seems more realistic and frequently met in geophysics, let us begin the description with the case of $\phi_b = 0$ representing not only purely theoretical aspect but also practical one for rather slow mixing in the water.

Considering the case of $\phi_b = 0$ and $a(t) \ll b(t)$, after substitution of da/dt from Eq. (28) to Eq. (32), we find the mushy layer-ocean boundary

$$b(t) = \frac{k_w(T_0(t) - T_b(t))}{\alpha_h \rho_w c_w u (T_b(t) - T_\infty(t))}, \quad (34)$$

whereas $T_b(t)$ is determined by substitution of $\partial T_m/\partial z = -m \partial S_m/\partial z$ from Eq. (32) to Eq. (33). The result is

$$T_b(t) = -m S_b(t) = -\frac{m S_\infty(t) + P T_\infty(t)}{1 - P}, \quad P = \frac{\alpha_h}{\alpha_s} \frac{D_w}{a_w}. \quad (35)$$

The solid phase-mushy layer boundary can be found, as before, by integration of Eq. (28) in the form

$$a(t) = a(0) + \int_0^t \frac{(T_0(t) - T_b(t)) D_w}{b(t) T_0(t)} dt. \quad (36)$$

Let us now construct analytical solutions for more natural case of $\phi_b \neq 0$ corresponding to ablation of crystal tips.

Keeping in mind expression (28) which is valid for turbulent mixing in the ocean as well as for nonturbulent conditions, and considering the case $a(t) \ll b(t)$, we obtain two explicit relations for

the solid fraction $\varphi_b(t)$ from the boundary conditions (32) and (33)

$$\varphi_b = -\frac{k_w(T_b - T_0) - \alpha_h \rho_w c_w u(T_\infty - T_b)b}{(k_i - k_w)(T_b - T_0) - L_V b db/dt}, \quad (37)$$

$$\varphi_b = \frac{\alpha_s u(mS_\infty + T_b)b + D_w(T_b - T_0)}{D_w(T_b - T_0) + bT_b db/dt}. \quad (38)$$

Equating the right-hand sides of Eqs. (37) and (38), we come to the Cauchy problem for determination of $b(t)$

$$\frac{db}{dt} = \frac{(T_b - T_0)[bf_3 + k_i D_w(T_b - T_0)]}{b[bf_4 + (T_b - T_0)(D_w L_V - T_b k_w)]}, \quad (39)$$

where

$$f_3(t) = u(t)[\alpha_s(mS_\infty(t) + T_b(t))(k_i - k_w) - \alpha_h \rho_w c_w (T_\infty(t) - T_b(t))D_w],$$

$$f_4(t) = u(t)[\alpha_s L_V(mS_\infty(t) + T_b(t)) + T_b(t)\alpha_h \rho_w c_w (T_\infty(t) - T_b(t))],$$

and $b(0)$ is a given value. Now, the phase transition boundary $a(t)$, the solid fractions φ_a and φ_b can be found from expressions (2), (31) and (37), whereas T_b represents a given temperature in contrast with the nonturbulent scenario where a condition of marginal equilibrium of the liquid, Eq. (13), holds true. Because heat and salt turbulent fluxes will blur this condition, the problem under question has one fewer boundary conditions than its nonturbulent analog. From the physical point of view the reason is that temperature T_b is completely determined by turbulent mixing in the ocean, which in its turn depends on geophysical conditions occurring in nature.

Letting u to zero in Eq. (39) and integrating the result we get approximate expression for $b(t)$ in the case of rather slow mixing in the water

$$b(t) = \sqrt{2k_i D_w \int_0^t \frac{(T_b - T_0)dt}{D_w L_V - T_b k_w} + b^2(0)}.$$

This prehistory integral reminds its analogs obtained by Alexandrov et al. [5], Alexandrov and Malygin [8], Alexandrov et al. [9] for the limiting case of isothermal ocean.

It is important to keep in mind that Eq. (39) can be integrated in the case when all values entering in its right-hand side are constants. This situation corresponds to steady-state conditions in the atmosphere and the ocean. So, in this case, designating

$$\alpha_1 = f_3(T_b - T_0), \quad \alpha_2 = f_4, \quad \beta_1 = (T_b - T_0)^2 k_i D_w, \quad \beta_2 = (T_b - T_0)(D_w L_V - T_b k_w),$$

after some mathematical manipulations, we get an expression showing nonlinear dynamics of boundary $b(t)$ in terms of its inverse function

$$t(b) = \frac{1}{\alpha_1^2} \left[\frac{\alpha_2(b - b(0))}{2} (\alpha_1^2(b + b(0)) - 2\beta_1\alpha_1) + \alpha_1\beta_2(b - b(0)) - \beta_1(\beta_2 - \alpha_2\beta_1) \ln \left| \frac{\alpha_1 b + \beta_1}{\alpha_1 b(0) + \beta_1} \right| \right].$$

5. Model Results for Evolution of Leads

In order to compare the theory with experiments, let us pay our attention to solidification dynamics of young sea ices playing a very important role in the surface heat and mass balance of the Arctic Ocean. This ice is formed, for example, due to the divergence of wind stress which continually produces cracks in the perennial sea ice cover known as leads. In the Arctic winter, the relatively warm water in leads is exposed to the cold air above it. A thin veneer of ice rapidly forms across an exposed lead. After one day's growth the layer of ice is about 10 cm deep, which is still thin compared with the surrounding ice, which is typically several meters thick. We consider the initial formation of ice in leads and its growth during the first few days on the basis of observations carried out by Morison et al. [23] (see also Wettlaufer et al. [30]). We will not dwell on this point in detail. However, we will point out main features of the Lead Experiment field campaign. There were four main lead deployments during the six-week experiment. A particularly interesting deployment is "lead 3", which was the largest (approximately a kilometer wide) lead. Deployment at lead 3 began early on the morning of April 6, 1992 and was evacuated 2 days later. We describe observations from both of the buoys that were deployed late on the afternoon of April 6, 1992 (buoy 5 was deployed about 2 hours before the buoy 6).

Figs. 2 and 3 demonstrate the temperature-time traces and time series of ice thickness in accordance with the theory under consideration and experimental data (Morison et al. [23], Wettlaufer et al. [30]) for evolution of young sea ices.

In calculations, the following values have been used: $T_b = -1.97^\circ\text{C}$, $m = 0.052^\circ\text{C} \cdot \text{psu}^{-1}$, $L_V = 3072 \cdot 10^3 \text{ W} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-3}$, $k_i = 2.03 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$, $k_w = 0.56 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$, $D_w = 1.2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $\rho_w = 1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $c_w = 4187 \text{ W} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$, $T_\infty = -1.7^\circ\text{C}$, $S_\infty = 34.5 \text{ psu}$, $\alpha_s u = 0.18 \cdot 10^{-5} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, $\alpha_h/\alpha_s = 18.75$.

It is important to keep in mind that the sea ice/ocean interface in nature does not divide pure ice and freezing ocean, and divides the mushy layer with a high content of ice and sea water free of ice structures. The sea ice/mushy layer interface, $a(t)$, lags behind the mushy layer/ocean interface, $b(t)$, by virtue of the fact that the process of ice formation is hampered within the mushy layer with a high content of ice (all of the impurities rejected by the ice lattice are initially retained within the interstices of a layer of sea ice).

Concluding Remarks

In this study, we have focused attention on the mathematical model of a mushy layer in the presence of nonturbulent and turbulent transfer in the liquid phase with special attention to evolution of ices in laboratory and natural conditions. Taking into account reasonable physical hypotheses we found explicit analytical solutions of nonlinear evolutionary equations describing heat and mass transfer during the phase transition between two moving boundaries in the case of four possible scenarios: nonturbulent and turbulent conditions with $\varphi_b = 0$ and $\varphi_b \neq 0$. Our solutions are in good agreement with existing laboratory experiments and field observations.

Acknowledgement

This work was made possible in part due to the financial support of Academia Sinica (Taiwan), Russian Foundation for Basic Research under the project 08-01-00298 and the Federal Target Program "Scientific and Academic – Teaching Staff of Innovative Russia" in 2009–2013.

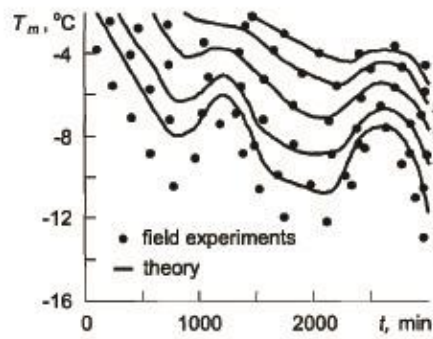


Fig. 2. Temperature-time traces for buoy 5 at lead 3 in accordance with the LeadEx experiment and the theory under consideration. Numbers at the curves corresponding to each trace designate the depths (expressed in centimeters) measured from the ice/atmosphere interface. The curve at $z = 0$ cm represents the atmospheric temperature at the ice surface.

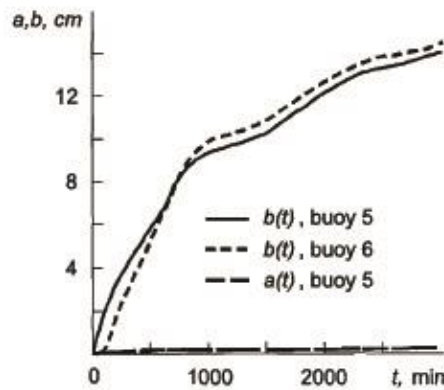


Fig. 3. Time series of ice thickness for buoy 5 and buoy 6 at lead 3 in accordance with the theory under consideration.

REFERENCES

1. Alexandrov, D. V., Buyevich, Yu. A., Mansurov, V. V., Vabishchevich, P. N., and Churbanov, A.G., Computer Simulation of Binary Melt Crystallization with Changeover of Boundary Conditions, Multiple Scale Analyses and Coupled Physical Systems, In: *Symposium Saint-Venant*, Paris, France, 1997, pp. 529–534.
2. Alexandrov, D. V., Solidification with a Quasiequilibrium Mushy Region: Exact Analytical Solution of Nonlinear Model, *J. Crystal Growth*, 2001, 222, pp. 816–821.

3. Alexandrov, D. V., Solidification with a Quasiequilibrium Two-Phase Zone, *Acta Mater.*, 2001, **49**, pp. 759–764.
4. Alexandrov, D. V. and Aseev, D. L., One-Dimensional Solidification of an Alloy with a Mushy Zone: Thermodiffusion and Temperature-Dependent Diffusivity, *J. Fluid Mech.*, 2005, **527**, pp. 57–66.
5. Alexandrov, D. V., Malygin, A. P., and Alexandrova, I. V., Solidification of Leads: Approximate Solutions of Non-Linear Problem, *Annals Glaciol.*, 2006, **44**, pp. 118–122.
6. Alexandrov, D. V. and Malygin, A. P., Self-Similar Solidification of an Alloy from a Cooled Boundary, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2006, **49**, pp. 763–769.
7. Alexandrov, D. V. and Malygin, A. P., Analytical Description of Seawater Crystallization in Ice Fissures and their Influence on Heat Exchange Between the Ocean and the Atmosphere, *Doklady, Earth Sci.*, 2006, **411A**, No. 9, pp. 1407–1411.
8. Alexandrov, D. V., Aseev, D. L., Nizovtseva, I. G., Huang, H.-N., and Lee, D., Nonlinear Dynamics of Directional Solidification with a Mushy Layer. Analytic Solutions of the Problem, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2007, **50**, pp. 3616–3623.
9. Aseev, D. L. and Alexandrov, D. V., Unidirectional Solidification with a Mushy Layer. The Influence of Weak Convection, *Acta Mater.*, 2006, **54**, pp. 2401–2406.
10. Avdonin, N. A., *Mathematical Description of Crystallization Processes*, Zinatne, Riga, 1980.
11. Batchelor, G. K., Transport Properties of Two-Phase Materials with Random Structure, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1974, **6**, pp. 227–255.
12. Borisov, V. T., *Theory of the Two-Phase Zone of a Metal Ingot*, Metallurgia, Moscow, 1987.
13. Buyevich, Yu. A., Alexandrov, D. V., and Mansurov, V. V., *Macrokineics of Crystallization*, Begell House, New York, 2001.
14. Buyevich, Yu. A. and Alexandrov, D. V., *Heat Transfer in Dispersions*, Begell House, New York, 2005.
15. Fowler, A. C., The Formation of Freckles in Binary Alloys, *IMA J. Appl. Math.*, 1985, **35**, pp. 159–174.
16. Hills, R. N., Loper, D. E., and Roberts, P. H., A Thermodynamically Consistent Model of a Mushy Zone, *Quart. J. Appl. Math.*, 1983, **36**, pp. 505–539.
17. Huppert, H. E. and Worster, M. G., Dynamic Solidification of a Binary Alloy, *Nature*, 1985, **314**, pp. 703–707.
18. Ivantsov, G. P., “Diffusive” Supercooling in Binary Alloy Solidification, *Trans. Acad. Sci. USSR [Doklady Akademii Nauk SSSR]*, 1951, **81**, pp. 179–182 [in Russian].
19. Koyalo, M. V., Investigation of the Feasibility of Supercooling Melt in the Two-Dimensional Case, In: *Problems of the Theory of Crystallization*, 1974, Riga.
20. Martin, S. and Kauffman, P., The Evolution of Under-Ice Melt Ponds, or Double Diffusion at the Freezing Point, *J. Fluid Mech.*, 1974, **44**, No. 3, pp. 507–527.
21. Meirmanov, A. M., The Stefan Problem, In: *W. De Gruyter Expositions in Mathematics*, 1992, Berlin.
22. Morison, J., McPhee, M., Muench, R., et al., The LeadEx Experiment, *EOS Trans. AGU*, 1993, **74**, pp. 393–397.
23. McPhee, M. G., The Upper Ocean, In: *The Geophysics of Sea Ice*, Plenum, New York, 1986, pp. 133–141.
24. McPhee, M. G., A Time-Dependent Model for Turbulent Transfer in a Stratified Oceanic Boundary Layer Under Pack Ice, *J. Geophys. Res.*, 1987, **92**, pp. 6987–6986.
25. McPhee, M. G., Maykut, G. A., and Morison, J. H., Dynamics and Thermodynamics of the Ice/Upper Ocean System in the Marginal Ice Zone of the Greenland Sea, *J. Geophys. Res.*, 1987, **92**, No. C7, pp. 7017–7031.

26. Notz, D., McPhee, M. G., Worster, M. G., Maykut, G. A., Schünzen, K. H., and Eicken, H., Impact of Underwater-Ice Evolution on Arctic Summer Sea Ice, *J. Geophys. Res.*, 2003, **108**, No. C7, pp. 3223–3228.
27. Owen, P. R. and Thomson, W. R., Heat Transfer Across Rough Surfaces, *J. Fluid Mech.*, 1963, **15**, pp. 321–334.
28. Perovich, D. K. and Gow, A. J., A Quantitative Description of Sea Ice Inclusions, *J. Geophys. Res.*, 1996, **101**, pp. 18327–18343.
29. Wettlaufer, J. S., Worster, M. G., and Huppert, H. E., Solidification of Leads: Theory, Experiment and Field Observations, *J. Geophys. Res.*, 2000, **105**, pp. 1123–1134.
30. Worster, M. G., Solidification of an Alloy from a Cooled Boundary, *J. Fluid Mech.*, 1986, **167**, pp. 481–501.
31. Yaglom, A. M. and Kader, B. A., Heat and Mass Transfer Between a Rough Wall and Turbulent Flow at High Reynolds and Peclet Numbers, *J. Fluid Mech.*, 1974, **62**, pp. 601–623.

□♦♦♦□

УДК 536.421.4

© 2010 г. Д. В. Александров¹, И. В. Рахматулина, А. П. МальгинК ТЕОРИИ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ С ДВУХФАЗНОЙ ЗОНОЙ
КОНЦЕНТРАЦИОННОГО ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЯ

Проведено теоретическое исследование процесса направленной кристаллизации бинарных систем при наличии протяженной области фазового перехода. Развита математическая модель процесса, и построено ее приближенное аналитическое решение с учетом нелинейного уравнения Ликшильдуса.

Ключевые слова: фазовые переходы, кристаллизация, сплавы, нелинейный логсидус.

ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что процессы затвердевания играют важную роль в металлургии и во многих случаях полностью определяют физические и механические свойства закристаллизовавшихся веществ. Математические модели этих процессов берут начало от классической постановки Стефана с плоским фронтом [1]. Однако такой режим кристаллизации в практических условиях реализуется достаточно редко. Обычно плоский фронт затвердевания разрушается благодаря возникновению термического или концентрационного переохлаждения [2–4]. Концентрационное переохлаждение, появляющееся перед фронтом кристаллизации в результате превышения градиентом концентрации своего температурного аналога, приводит к возникновению благоприятных условий для роста отдельных выступов твердой фазы, которые создают перед плоской границей кристалл – расплав область смешанного состояния двух фаз – двухфазную зону. Наличие такой области фазового перехода приводит к необходимости записывать уравнения тепло- и массопереноса в трех областях – твердой, жидкой и располагающейся между ними двухфазной, которые разделены двумя движущимися границами фазового превращения.

С точки зрения математической физики такой процесс описывается нелинейной системой уравнений и граничных условий с подвижными границами, положение которых неизвестно и определяется из решения задачи. Общих методов решения таких задач не существует, и каждая отдельная ситуация требует разработки специального подхода, который часто сам по себе является новаторским. К числу таких методов, развитых для задач направленной кристаллизации, относятся метод перехода к новой переменной – доле твердой фазы [5–7] – или метод исключения временной производной доли твердой фазы [8, 9] с целью интегрирования нелинейных уравнений тепло- и массопереноса.

Математическая модель процесса затвердевания при наличии зоны концентрационного переохлаждения была развита несколько десятков лет назад в работах [10–14] (следуя этим моделям, будем рассматривать ситуацию, когда концентрационное переохлаждение в двухфазной зоне практически полностью компенсируется в результате интенсивного выделения скрытой теплоты кристаллизации растущими элементами твердой фазы). Однако, вследствие уже упомянутой сложности постановки, задача была решена лишь в нескольких ситуациях. Так, метод решения нелинейных уравнений для ситуации квазистационарного затвердевания (стационарного в движущейся системе отсчета, привязанной к двухфазной зоне), которое характерно, например, для

¹dmitri.alexandrov@usu.ru

методов вытягивания кристалла из расплава с постоянной скоростью, предложен в [5–7, 15]. В работах [16–19] дано обобщение этого метода для случаев слабой конвекции [16], термодиффузии и температурной зависимости коэффициента диффузии [17, 18], эффектов слабой неравновесности процесса [19]. Метод построения решений нелинейных уравнений двухфазной зоны для автомодельных условий затвердевания, основанный на разложении неизвестных функций в степенные ряды, развит в [20, 21], а метод решения указанных уравнений для сильно нестационарных условий процесса при линейном температурном профиле разработан в [22–25]. Далее, аналитический способ решения уравнений двухфазной зоны при учете многокомпонентности кристаллизующейся системы на примере рассмотрения тройных расплавов предложен в работах [8, 26, 27].

Многобразие различных реализаций процесса направленного затвердевания и влияние на процесс различных нелинейных эффектов оставляют в настоящее время нерешенными большое число задач. Так, известно, что уравнение ликвидуса может существенно отличаться от часто используемой линейной зависимости [28–31].

Дать полный обзор современных исследований по развитию теории двухфазной зоны в рамках настоящей работы не представляется возможным. Более подробный обзор можно найти в монографии [4]. В настоящей работе, являющейся продолжением и развитием научных исследований по данной тематике, изучается влияние нелинейности уравнения линии ликвидуса на процесс направленного затвердевания.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ЗАТВЕРДЕВАНИЯ С ЗОНОЙ КОНЦЕНТРАЦИОННОГО ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЯ

Рассмотрим процесс направленного затвердевания бинарного расплава или раствора с квазиравновесной двухфазной зоной. Будем считать, что процесс кристаллизации протекает с постоянной скоростью u_z вдоль пространственной оси ξ . Твердая и жидкая фазы системы занимают области $\xi < u_z \tau$ и $\xi > u_z \tau + \delta$, а регион $u_z \tau < \xi < u_z \tau + \delta$ занят двухфазной зоной (τ – время, δ – протяженность области двухфазного состояния вещества). Для описания процессов переноса тепла и массы будем использовать квазиравновесную модель, приведенную ранее, например, в работах [5–7].

Уравнения тепло- и массопереноса в двухфазной зоне имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(k_m(\varphi) \frac{\partial T_m}{\partial \xi} \right) + L_V \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = 0, \quad u_z \tau < \xi < u_z \tau + \delta, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} ((1 - \varphi) \sigma_m) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(D(\varphi) \frac{\partial \sigma_m}{\partial \xi} \right) - k \sigma_m \frac{\partial \varphi}{\partial \tau}, \quad (2)$$

$$u_z \tau < \xi < u_z \tau + \delta,$$

где T_m и σ_m – температура и концентрация примеси в двухфазной зоне, φ – доля твердой фазы, L_V – скрытая теплота затвердевания, k – равновесный коэффициент распределения примеси, а коэффициенты теплопроводности k_m и диффузии примеси D в двухфазной зоне считаются известными функциями доли твердой фазы. Здесь, следуя работе [32] и известному правилу смесей, будем использовать следующие выражения для этих коэффициентов:

$$k_m(\varphi) = k_2 \varphi + k_1 (1 - \varphi), \quad D(\varphi) = D_1 (1 - \varphi), \quad (3)$$

где k_2 и k_1 – коэффициенты теплопроводности по твердой и жидкой фазам, а D_1 – коэффициент диффузии примеси по жидкой фазе (диффузией примеси в твердой фазе традиционно пренебрегается). Вместо выражений (3) можно использовать и другие зависимости, что никак не скажется кардинальным образом на развиваемой теории.

Двухфазная зона рассматривается в состоянии термодинамического равновесия. Это означает, что температура ее обеих фаз равна температуре фазового перехода, зависящей от концентрации примеси:

$$T_m = T_m(\sigma_m). \quad (4)$$

Будем считать, что, вследствие быстрой релаксации температурного поля по сравнению с распределением примеси, в расплаве и твердой фазе градиенты температуры фиксированы (такие условия описывают процессы вытягивания кристалла из расплава)

$$\frac{\partial T}{\partial \xi} = g_1, \quad \xi > u_z \tau + \delta; \quad \frac{\partial T}{\partial \xi} = g_2, \quad \xi < u_z \tau, \quad (5)$$

а концентрация примеси в расплаве σ_1 удовлетворяет уравнению диффузии

$$\frac{\partial \sigma_1}{\partial \tau} = D_1 \frac{\partial^2 \sigma_1}{\partial \xi^2}, \quad \xi > u_z \tau + \delta. \quad (6)$$

Пограничные условия на границах двухфазной зоны можно представить как

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi_*, \quad k_g g_2 = k_m(\varphi_*) \frac{\partial T_m}{\partial \xi} - L_V(1 - \varphi_*)u_z, \\ (1 - k)\sigma_m u_z + D_1 \frac{\partial \sigma_m}{\partial \xi} &= 0, \quad \xi = u_z \tau, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\varphi = 0, \quad \frac{\partial T_m}{\partial \xi} = g_1, \quad \frac{\partial \sigma_m}{\partial \xi} = \frac{\partial \sigma_1}{\partial \xi}, \quad \sigma_m = \sigma_1, \quad \xi = u_z \tau + \delta. \quad (8)$$

Концентрацию примеси в расплаве вдали от двухфазной зоны будем считать известной и равной σ_∞ .

Математическая модель (1)–(8) квазистационарного процесса затвердевания является замкнутой и позволяет определить все неизвестные величины и зависимости.

Будем считать, что в квазистационарном режиме направленного затвердевания в системе отсчета, движущейся со скоростью u_z в положительном направлении оси ξ вместе с двухфазной зоной, искомые функции зависят лишь от следующей безразмерной пространственно-временной переменной:

$$x = \frac{u}{D_1}(\xi - u_z \tau). \quad (9)$$

Производя замену переменной в уравнении (1) с помощью выражения (9) и интегрируя полученный результат с учетом уравнения ликвидуса (4) и пограничных условий (7) и (8), находим скорость процесса кристаллизации и выражение для градиента безразмерной концентрации примеси C_m в двухфазной зоне

$$u_z = \frac{k_z g_2 - k_1 g_1}{L_V} \frac{dC_m}{dx} = \frac{P \Lambda_1 G_1 + \varphi(x)}{P \Lambda_0(\varphi) g(C_m)}, \quad 0 < x < \varepsilon. \quad (10)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} C_m &= \frac{\sigma_m}{\sigma_\infty}, \quad D_0(\varphi) = \frac{D(\varphi)}{D_1}, \quad \frac{dT_m}{d\sigma_m} = f(\sigma_m), \quad g(C_m) = \frac{f(\sigma_m)}{f_0}, \quad f_0 = f(0), \quad \varepsilon = \frac{u_z \delta}{D_1}, \\ \Lambda_0(\varphi) &= \frac{k_m(\varphi)}{k_s}, \quad P = \frac{k_z f_0 \sigma_\infty}{L_V D_1}, \quad \Lambda_1 = \Lambda_0(0), \end{aligned}$$

$$G_1 = \frac{L_1 D_1}{u_2 f \sigma_\infty}, \quad G_2 = \frac{L_2 D_1}{u_2 f \sigma_\infty}.$$

Далее, выполняя замену переменной (9) в уравнении (2), используя второе соотношение (10) и переходя к дифференцированию по доле твердой фазы по аналогии с работами (5)–(7), получаем

$$\frac{d}{d\varphi} \left[(1 - \varphi) C_m + \frac{h(\varphi)}{g(C_m)} \right] + k C_m = 0, \quad (11)$$

где

$$h(\varphi) = \frac{D_0(\varphi) [P \Lambda_1 G_1 + \varphi]}{P \Lambda_0(\varphi)}.$$

Уравнение (11) можно легко проинтегрировать при нулевом значении коэффициента распределения примеси (или в ситуации, когда второе слагаемое в левой части уравнения (11) является малым, что, например, реализуется для водных солевых растворов, когда $k \approx 10^{-4}$ [33]). Используя после интегрирования в этом случае зависимость $h(\varphi)$, из квадратного уравнения легко находим явный вид функции $\varphi(C_m)$ при произвольном уравнении ликвидуса (4).

При отличном от нуля значении коэффициента k задачу можно свести к задаче Коши. Для определенности зададимся явной зависимостью $T_m(\sigma_m)$. Разложим эту функцию в ряд в окрестности нулевой точки с точностью до квадратичного по концентрации примеси слагаемого:

$$T_m(\sigma_m) = T_0 + m \sigma_m + n \sigma_m^2.$$

Здесь T_0 представляет собой температуру фазового перехода чистой (без примеси) системы, m – наклон линии ликвидуса, n – коэффициент отклонения уравнения ликвидуса от линейного вида.

Используя это разложение, перепишем уравнение (11) в следующем виде:

$$\left[(1 - \varphi)(1 + r C_m)^2 - h(\varphi) \right] \frac{d C_m}{d \varphi} + (k - 1)(1 + r C_m)^2 C_m + (1 + r C_m) \frac{d h}{d \varphi} = 0. \quad (12)$$

где использованы соотношения

$$g(C_m) = 1 + r C_m, \quad r = \frac{2n\sigma_\infty}{m}.$$

Интегрируя теперь уравнение (6) и используя пограничные условия (8), получаем распределение концентрации примеси в расплаве $C_1(x) = \sigma_1/\sigma_\infty$ и граничное значение концентрации примеси на межфазной поверхности двухфазная зона – жидкая фаза:

$$\begin{aligned} C_1(x) &= 1 + b e^{-x}, \quad x > \varepsilon, \\ (C_m)_{\varphi=0} &= 1 + b e^{-\varepsilon}, \quad x = \varepsilon, \end{aligned} \quad (13)$$

где b определяется из решения квадратного уравнения

$$r e^{-\varepsilon} b^2 + (1 + r) b + G e^{\varepsilon} = 0.$$

Дифференциальное уравнение (12) с граничным условием (13) образуют одноточечную задачу Коши для определения функции $C_m(\varphi)$, решение которой можно легко найти различными численными способами.

Граничное условие (7) баланса массы после подстановки (9) приводит к трансцендентному уравнению для определения пограничного значения φ_* доли твердой фазы на границе между твердым материалом и двухфазной зоной. Для рассматриваемого разложения это условие можно представить как

$$(1 - k)C_m(\varphi_*)\rho\Lambda_0(\varphi_*)(1 + rC_m(\varphi_*)) + \rho\Lambda_1G + \varphi_* = 0. \quad (14)$$

Для нахождения φ_* из выражения (14) в него необходимо подставить зависимость $C_m(\varphi_*)$, определяемую из решения задачи Коши.

Поскольку концентрация примеси в двухфазной зоне является функцией лишь доли твердой фазы (это, в частности, следует из уравнения (12)), ее производную по переменной x можно записать следующим образом:

$$\frac{dC_m}{dx} = \frac{dC_m}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dx}.$$

После интегрирования отсюда определяем распределение доли твердой фазы в двухфазной зоне через обратную функцию $x(\varphi)$:

$$x(\varphi) = \int_{\varphi_*}^{\varphi} \frac{dC_m/d\varphi}{dC_m/dx} d\varphi. \quad (15)$$

В выражении (15) производная концентрации примеси по доле твердой фазы вычисляется путем решения задачи Коши (12), (13), а производная концентрации примеси по пространственно-временной переменной определяется выражением (10).

Подставляя в интеграл (15) граничную точку $\varphi = 0$ при $x = \varepsilon$, находим толщину двухфазной зоны

$$\delta = \frac{D_1}{u_s} \varepsilon = \int_{\varphi_*}^0 \frac{dC_m/d\varphi}{dC_m/dx} d\varphi. \quad (16)$$

Выражения (10)–(16) полностью определяют решение задачи о направленном затвердевании бинарного расплава в квазистационарном режиме с нелинейным законом ликвидуса.

ВЫВОДЫ

На рис. 1–4 проиллюстрировано решение задачи для железоникелевого сплава, теплофизические характеристики которого приведены в работах [6, 7]. На рис. 1 показано влияние коэффициента n на отклонение уравнения ликвидуса (4) от линейной зависимости. Небольшие отклонения от линейной функции при фиксированной концентрации примеси в двухфазной зоне могут изменить приведенную температуру фазового перехода $T_m - T_0$ в несколько раз. Специально отметим, что такие отклонения, часто встречающиеся на практике, учитываются лишь в редких ситуациях (см., например, серию работ [26, 29, 34]). Рис. 1 демонстрирует, что приведенная температура фазового перехода имеет тенденцию к понижению с уменьшением параметра n . Уменьшение этой температуры (рис. 2 и 3) может сильно изменить фазовый состав двухфазной зоны. А именно, падение температуры приводит к более интенсивному фазовому превращению и росту доли твердой фазы.

Увеличение φ_* с уменьшением n приводит к возрастанию протяженности области фазового перехода, показанной на рис. 4 (при неизменном значении температурного градиента g , протяженность двухфазной зоны δ растет при уменьшении n). Физиче-

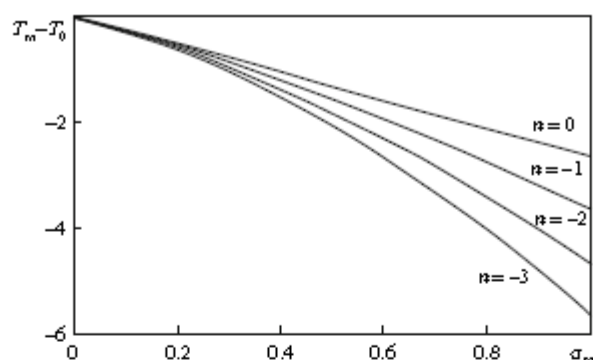


Рис. 1. Приведенная температура фазового перехода в зависимости от концентрации примеси при $g_s = 5^\circ \text{C}/\text{см}$, $g_l = 1^\circ \text{C}/\text{см}$.

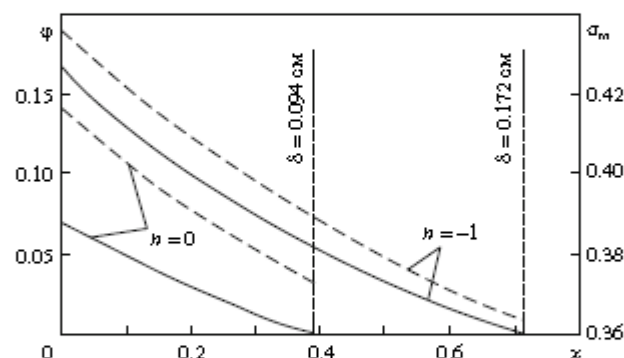


Рис. 2. Распределение доли твердой фазы (сплошные линии) и концентрации примеси (пунктирные) в двухфазной зоне при различных значениях коэффициента n . Вертикальные линии показывают протяженность двухфазной зоны, $g_s = 5^\circ \text{C}/\text{см}$, $g_l = 1^\circ \text{C}/\text{см}$.

ски это объясняется тем обстоятельством, что, вследствие эффекта вытеснения примеси твердой фазой в глубь расплава и уменьшения температуры $T_m - T_0$ (при уменьшении n) для сохранения условий протекания квазистационарного процесса (для постоянства температурного градиента в жидкости), межфазная граница двухфазная зона – расплав должна отодвигаться дальше в сторону жидкости по сравнению, например, со случаем линейного ликвидуса, когда $n = 0$. Увеличение протяженности области фазового перехода и доли твердой фазы в этой области будет существенно изменять форму и структурный состав растущих в ней элементов твердой фазы, а также видоизменять внутреннюю структуру затвердевающих материалов вследствие различных условий эволюции динамической и морфологической неустойчивостей таких процессов (см., например, работы [35–38]).

Проведение анализа развития таких неустойчивостей с учетом нелинейности уравнения ликвидуса является отдельным предметом исследований. Интересно отметить

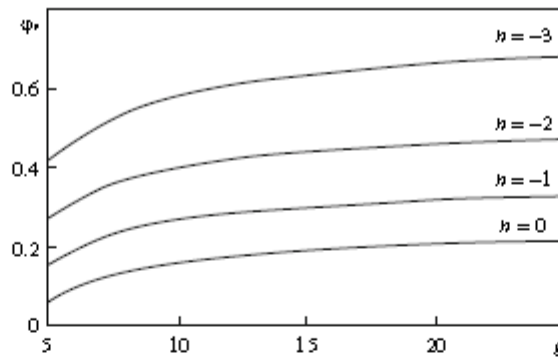


Рис. 3. Доля твердой фазы на границе кристалл – двухфазная зона в зависимости от градиента температур в твердой фазе при $g_1 = 1^\circ\text{C}/\text{см}$.

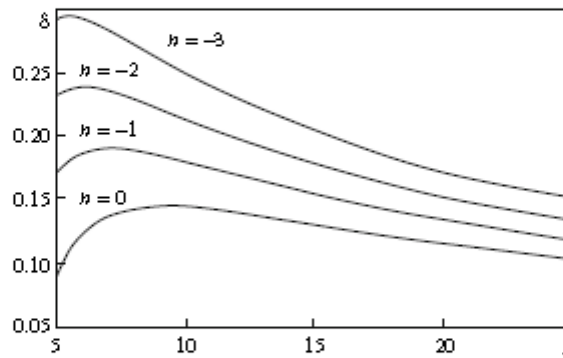


Рис. 4. Протяженность области фазового перехода в зависимости от градиента температур в твердой фазе при $g_1 = 1^\circ\text{C}/\text{см}$.

немонотонное поведение толщины области фазового перехода δ при изменении температурного градиента в твердой фазе при каждом фиксированном значении n (рис. 4). Физически это объясняется следующим образом. С одной стороны, увеличение данного градиента (теплопотока в твердую фазу) способствует более интенсивному росту твердой фазы в двухфазной зоне и приводит к увеличению ее протяженности δ . С другой, рост g_s приводит к увеличению концентрации примеси в каждой точке двухфазной области (см., например, рис. 4 работы [6]) и понижает температуру фазового перехода в соответствии с уравнением линии ликвидуса (рис. 1), что означает уменьшение толщины δ (поскольку вблизи границы двухфазная зона – жидкость $T_m \approx T_1 - g_1(\mu_s \tau + \delta) + \text{const}$ согласно первому выражению (5)). Также важно отметить, что при изменении параметра n распределения концентрации примеси и доли твердой фазы претерпевают почти самоподобный перенос (рис. 2). Это означает сохранение скейлинговых свойств зоны фазового перехода при нелинейном законе линии ликвидуса, обнаруженных ранее для различных условий протекания процесса кристаллизации [39, 40].

Главным результатом настоящей работы является вывод о том, что даже небольшие отклонения уравнения ликвидуса от линейной зависимости могут приводить к существенному изменению параметров процесса.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 08-01-00298, 10-03-96020 Урал) и ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009–2013 годы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рубинштейн Л. И. Проблема Стефана. — Рига: Звагтене, 1967.
2. Иванцов Г. П. Диффузионное переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава. — ДАН СССР, 1951, 81, № 2, с. 179–182.
3. Worster M. G. Solidification of an alloy from a cooled boundary. — J. Fluid Mech., 1986, 167, p. 481–501.
4. Buyevich Yu. A., Alexandrov D. V., Mansurov V. V. Macrokinetics of crystallization. — New York: Begell House, Inc., 2001.
5. Александров Д. В. К теории затвердевания с квазиравновесной двухфазной зоной. — Докл. АН, 2000, 375, № 2, с. 172–176.
6. Alexandrov D. V. Solidification with a quasiequilibrium mushy region: exact analytical solution of nonlinear model. — J. Cryst. Growth, 2001, 222, p. 816–821.
7. Alexandrov D. V. Solidification with a quasiequilibrium two-phase zone. — Acta Mater., 2001, 49, p. 739–764.
8. Александров Д. В. Нелинейная динамика затвердевания трехкомпонентных систем. — Докл. АН, 2008, 422, № 3, с. 322–326.
9. Alexandrov D. V., Ivanov A. A. Analytical solution for a problem of directional solidification in a ternary system. — Acta Physica Polonica A, 2009, 15, № 4, p. 786–790.
10. Борнсов В. Т., Виноградов В. В., Духин А. И. О применимости теории квазиравновесной двухфазной зоны к описанию кристаллизации сплава. — Изв. АН СССР, Металлы, 1971, № 6, с. 104–109.
11. Борнсов В. Т., Виноградов В. В., Тяжелыникова И. Л. Квазиравновесная теория двухфазной зоны и ее применение к затвердеванию сплавов. — Изв. вузов, Черная металлургия, 1977, № 5, с. 127–134.
12. Hills R. N., Loper D. E., Roberts P. H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone. — Q. J. Mech. Appl. Math., 1983, 36, p. 303–339.
13. Fowler A. C. The formation of freckles in binary alloys. — IMA J. Appl. Maths., 1985, 35, p. 159–174.
14. Борнсов В. Т. Теория двухфазной зоны металлического сплава. — М.: Металлургия, 1987.
15. Alexandrov D. V. Solidification with a quasiequilibrium mushy zone: exact analytical solution. — Int. J. Fluid Mech. Res., 2000, 27, № 2–4, p. 213–222.
16. Aseev D. L., Alexandrov D. V. Unidirectional solidification with a mushy layer. The influence of weak convection. — Acta Mater., 2006, 54, p. 2401–2406.
17. Alexandrov D. V., Aseev D. L. One-dimensional solidification of an alloy with a mushy zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity. — J. Fluid Mech., 2005, 527, p. 57–66.
18. Alexandrov D. V., Aseev D. L. Directional solidification with a two-phase zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity. — Comp. Mater. Sci., 2006, 37, p. 1–6.
19. Aseev D. L., Alexandrov D. V. Directional solidification of binary melts with a non-equilibrium mushy layer. — Int. J. Heat Mass Transfer, 2006, 49, p. 4903–4909.
20. Alexandrov D. V., Malygin A. P. Self-similar solidification of an alloy from a cooled boundary. — Int. J. Heat Mass Transfer, 2006, 49, p. 763–769.
21. Александров Д. В., Иванов А. А., Малигин А. П. Автомодельное затвердевание с двухфазной зоной от охлаждаемой стенки. — Вестн. Удмурт. ун-та. — Ижевск, 2008, вып. 1, с. 14–23.
22. Александров Д. В., Малигин А. П. Аналитическое описание кристаллизации морской воды в трещинах льдов и ее влияние на теплообмен между океаном и атмосферой. — Докл. АН, 2006, 411, № 3, с. 390–394.

23. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V. Solidification of leads: approximate solutions of non-linear problem. — *Ann. Glaciol.*, 2006, 44, p. 118–122.
24. Alexandrov D.V., Aseev D.L., Nizovtseva I.G. et al. Nonlinear dynamics of directional solidification with a mushy layer. Analytic solutions of the problem. — *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2007, 50, p. 3616–3623.
25. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Malygin A.P. et al. Unidirectional solidification of binary melts from a cooled boundary: analytical solutions of a nonlinear diffusion-limited problem. — *J. Phys.: Cond. Matt.*, 2008, 20, p. 114103–01–06.
26. Александров Д.В., Иванов А.О. Задача Стефана затвердевания трехкомпонентных систем при наличии дендритных областей фазового перехода. — *ЖЭТФ*, 2009, 135, вып. 5, с. 942–950.
27. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Analytical solution for a problem of directional solidification in a ternary system. — *Acta Physica Polonica A*, 2009, 115, № 4, p. 786–790.
28. Jordan A.S. The liquidus surfaces of ternary systems involving compound semiconductors: II. Calculation of the liquidus isotherms and component partial pressures in the Ga–As–Zn and Ga–P–Zn systems. — *Metall. Trans.*, 1971, 2, № 7, p. 1939–1963.
29. Aitta A., Huppert H.E., Worster M.G. Diffusion-controlled solidification of a ternary melt from a cooled boundary. — *J. Fluid Mech.*, 2001, 432, p. 201–217.
30. Wang H., Liu F., Chen Z. et al. Analysis of non-equilibrium dendrite growth in a bulk undercooled alloy melt: Model and application. — *Acta Mater.*, 2007, 55, p. 497–506.
31. Zhang J.T., Rudtsch S., Fahr M. The influence of antimony on the tin point. — *Int. J. Thermophys.*, 2008, 29, p. 151–157.
32. Batchelor G.K. Transport properties of two-phase materials with random structure. — *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1974, 6, p. 227–255.
33. Gross G.W., Gutjahr A., Caylor K. Recent experimental work on solute redistribution at the ice/water interface: Implications for electrical properties and interface processes. — *J. Phys. Colloq.*, 1987, 48(C1), p. 527–533.
34. Anderson D.M. A model for diffusion-controlled solidification of ternary alloys in mushy layers. — *J. Fluid Mech.*, 2003, 483, p. 165–197.
35. Mullins W.W., Sekerka R.F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy. — *J. Appl. Phys.*, 1964, 35, p. 444–451.
36. Anderson D.M., Worster M.G. A new oscillatory instability in a mushy layer during the solidification of binary alloys. — *J. Fluid Mech.*, 1996, 307, p. 245–267.
37. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. Dynamic stability analysis of the solidification of binary melts in the presence of a mushy region: changeover of instability. — *J. Crystal Growth*, 2000, 210, p. 797–810.
38. Alexandrov D.V. A nonlinear instability analysis of crystallization processes with a two-phase zone. — *J. Metast. Nanocryst. Mater.*, 2004, 20–21, p. 468–475.
39. Alexandrov D.V., Ivanov A.O., Komarovski M.E. An influence of a fractal-like mushy region on solidification process. — *Int. J. Fluid Mech. Res.*, 1999, 26, № 2, p. 224–231.
40. Александров Д.В., Иванов А.О. Скалярные свойства двухфазной зоны при направленной кристаллизации. — *Докл. АН*, 2002, 385, № 3, с. 323–327.

УДК 536.421.4

© 2011 г. Д. В. Александров¹, Д. Л. Асеев, А. П. Малыгин

К ТЕОРИИ ПРОЦЕССОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ С НЕРАВНОВЕСНОЙ ДВУХФАЗНОЙ ЗОНОЙ

Проведено теоретическое исследование процесса направленной кристаллизации бинарных систем при наличии неравновесной двухфазной зоны. Развита нелинейная математическая модель процесса и построено ее приближенное аналитическое решение с учетом процессов нуклеации и роста твердой фазы.

Ключевые слова: затвердевание, двухфазная зона, фазовые переходы, сплавы, нуклеация.

ВВЕДЕНИЕ

Молекулярно-кинетическая теория процесса нуклеации и методы расчета скорости нуклеации для однокомпонентных систем описаны во многих работах (см., например, [1–5]). Эта теория основана на том, что в результате флуктуации плотности в метастабильном расплаве образуются микрообразования новой фазы. При этом, если их размер превышает некоторый критический, они становятся способными к дальнейшему росту. В работе [6] (см., также, [2, 7]) приводится формула для скорости нуклеации

$$I = I_* \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta^3}\right), \quad (1)$$

где p – размерное число Гиббса, $\Delta\theta$ – переохлаждение в кристаллизующемся расплаве, I_* – предэкспоненциальный фактор (считается постоянной величиной). Будем предполагать, что частицы имеют сферическую форму, тогда их рост происходит по следующему закону, выведенному в [7]:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\beta_* \Delta\theta}{1 + \beta_* (L_V / \lambda_1) r}, \quad (2)$$

где r – радиус частицы, β_* – кинетический коэффициент, L_V – скрытая теплота фазового перехода, λ_1 – коэффициент теплопроводности расплава. Расчеты, проведенные в работе [8], показывают, что эта формула пригодна и для описания кристаллизации бинарных расплавов.

Будем моделировать рассматриваемую систему, как взвесь твердых сферических частиц в однокомпонентной переохлажденной жидкости, однородную в макроскопическом отношении. Эволюция кристаллов в такой двухфазной смеси описывается кинетическим уравнением для функции плотности распределения $f(t, r)$ частиц по радиусам и уравнением баланса тепла для величины переохлаждения $\Delta\theta$. Если пренебрегать

¹dmitri.alexandrov@usu.ru

случайными флуктуациями скорости роста частиц и предполагать поле температуры однородным, эти уравнения можно записать в следующей форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{dr}{dt} f \right) = 0, \quad (3)$$

$$\rho C \frac{d\Delta\theta}{dt} = -L_V \int_{r_{cr}}^{\infty} 4\pi r^2 \frac{dr}{dt} f dr, \quad \Delta\theta = \theta_p - \theta. \quad (4)$$

Здесь r_{cr} — минимальный размер кристаллов (радиус критических зародышей), ρ и C — плотность и удельная теплоемкость смеси, θ — температура, θ_p — температура фазового перехода. Для простоты полагаем, что эти коэффициенты не зависят от температуры, а также от объемной концентрации твердой фазы. Последнее приближенно справедливо при малых концентрациях твердых кристаллов, когда указанные величины характеризуют свойства жидкой фазы.

Далее рассматриваем такую ситуацию, когда жидкость, первоначально не содержащая кристаллов, практически мгновенно охлаждается в начальный момент ниже температуры замерзания на величину $\Delta\theta_0$. Тогда условия, которые нужно наложить на решения системы (3) и (4), имеют вид

$$f = 0, \quad \Delta\theta = \Delta\theta_0, \quad t = 0, \quad (5)$$

$$\frac{dr}{dt} f = I_* \exp\left(-\frac{r}{\Delta\theta^2}\right), \quad r = r_{cr}. \quad (6)$$

Совокупность уравнений (2)–(6) представляет собой полную систему соотношений для описания процесса объемной кристаллизации переохлажденного расплава. Однако, выписанные здесь уравнения не учитывают процессы укрупнения частиц в результате их взаимодействия (перегонка через жидкую фазу, агломерация, коагуляция и т.д.). Это означает, что общая объемная доля кристаллов в расплаве должна оставаться малой и не может превышать некоторого критического значения, выше которого данная теория не способна адекватно описать изучаемый процесс. Для исследования кристаллизации на более поздних стадиях необходимо применять кинетическую теорию, которая учитывает перечисленные выше эффекты [7].

Решение уравнения (3) с граничными условиями (5) и (6) можно записать в виде

$$f(t, r) = \left(1 + \beta_* \frac{L_V}{\lambda_t} r\right) \eta(x(t) - y(r)) H(x(t) - y(r)), \quad (7)$$

где $H(u)$ — функция Хевисайда,

$$x(t) = \beta_* \int_0^t \Delta\theta(\tau) d\tau, \quad y(r) = \int_0^r \left(1 + \beta_* \frac{L_V}{\lambda_t} r\right) dr = r + \frac{1}{2} \beta_* \frac{L_V}{\lambda_t} r^2.$$

С физической точки зрения функция Хевисайда, стоящая в правой части уравнения (7), показывает, что радиус кристаллов в зоне ограничен некоторым максимальным значением, которое имеют частицы, появившиеся в первоначальный момент времени. Кроме этого, для простоты полагаем радиус критических зародышей нулевым: $r_{cr} = 0$. Интегрируя уравнение (2) с граничным условием $r = 0$ при $t = \tau$, получаем

$$r = (\sqrt{1 + 2q(x(t) - x(\tau))} - 1)/q, \quad (8)$$

где $q = \beta_* L_V / \lambda_1$. Последнее соотношение определяет радиус $r(t)$ кристаллов, появившихся в момент времени $t = \tau$. В частности, при $\tau = 0$ формула (8) определяет радиус кристаллов, образовавшихся в начальный момент, к моменту времени t .

В соотношении (7) функция распределения f выражена через величину переохлаждения $\Delta\theta$, которая зависит от f посредством уравнения (4). Это не позволяет получить явное представление для плотности f как функции t и r . В этом и заключается главная трудность рассматриваемой нелинейной задачи. Однако, в работах [7, 9] предложен оригинальный способ решения этой проблемы. Подставим уравнение (7) в правую часть (4) и заменим переменную r при любом постоянном t на новую переменную τ при помощи равенства $x(\tau) = x(t) - y(r)$. При этом $\beta_* \Delta\theta(\tau) d\tau = (1 + qr) dr$, а пределы интегрирования $r = 0$ и $r = r_{\tau=0}^*$ по параметру r будут соответствовать пределам интегрирования $\tau = t$ и $\tau = 0$ по τ . Учитывая (8), получаем

$$\frac{d\Delta\theta}{dt} = -4\pi \frac{\beta_* L_V}{\rho C} \Delta\theta \int_0^t w(t, \tau) \exp(p \cdot S(\tau)) d\tau, \quad (9)$$

$$w(t, \tau) = \frac{1}{q^2} \frac{(\sqrt{1 + 2q(x(t) - x(\tau))} - 1)^2}{\sqrt{1 + 2q(x(t) - x(\tau))}}, \quad S(\tau) = -\frac{1}{\Delta\theta(\tau)^2}. \quad (10)$$

Для дальнейшего упрощения функционально-интегрального уравнения (9) учитываем, что обычно параметр p значительно больше $\Delta\theta^2$ [10]. Последнее соответствует достаточно высокой энергии активации процесса образования зародышей. В этом случае естественно использовать для приближенного вычисления интеграла в (9) известный метод Лапласа [11]. Из выражения для функции $S(\tau)$ следует, что

$$\frac{dS}{d\tau} = \frac{2}{\Delta\theta^3} \frac{d\Delta\theta}{d\tau} < 0,$$

т.е. максимум функции $S(\tau)$ достигается на границе $\tau = 0$ интервала ее определения. Используя для оценки производных от $\Delta\theta$ по τ уравнение (9), видим, что первые три производные от S по τ в точке $\tau = 0$ обращаются в нуль, а четвертая производная равна

$$S^{IV}(0) = \left. \frac{d^4 S}{d\tau^4} \right|_{\tau=0} = -16\pi \frac{\beta_*^2 L_V}{\rho C} \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta_0^2}\right) \neq 0.$$

С учетом лишь главного члена асимптотического разложения интеграла в (9), имеем [11]

$$\begin{aligned} \int_0^t w(t, \tau) \exp(p \cdot S(\tau)) d\tau &\approx \\ &\approx \frac{1}{4} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \left[-\frac{24}{p \cdot S^{IV}(0)} \right]^{1/4} \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta_0^2}\right) w(t, 0) = I_1 \cdot w(t, 0), \end{aligned}$$

где $\Gamma(\cdot)$ – гамма-функция Эйлера. Подставляя последнее выражение в (9), получаем

$$\frac{d\Delta\theta}{dt} = -4\pi \frac{\beta_* L_V}{\rho C} I_1 w(t, 0) \Delta\theta. \quad (11)$$

Преобразуем интегро-дифференциальное уравнение (11) к обыкновенному дифференциальному при помощи преобразования

$$\frac{d\Delta\theta}{dt} = \frac{d\Delta\theta}{dx} \frac{dx}{dt} = \beta_* \Delta\theta \frac{d\Delta\theta}{dx}.$$

Тогда, с учетом (10), из (11) получим следующее уравнение:

$$\frac{d\Delta\theta}{dx} = -\frac{l_2}{q^2} \frac{(\sqrt{1+2qx}-1)^2}{\sqrt{1+2qx}}, \quad l_2 = 4\pi \frac{l_1 L_V}{\rho C}. \quad (12)$$

С учетом граничного условия $\Delta\theta = \Delta\theta_0$ при $x = 0$ решение уравнения (12) имеет вид

$$\Delta\theta = \Delta\theta_0 - \frac{l_2}{q^2} \left(\frac{1}{3} (z^{3/2} - 1) - z + \sqrt{z} \right), \quad z = 1 + 2qx. \quad (13)$$

Зависимость времени t от параметра z описывается квадратурой

$$2q\beta_* \cdot t = \int_1^z \frac{dz}{\Delta\theta_0 - l_2/q^2 (1/3(z^{3/2} - 1) - z + \sqrt{z})}. \quad (14)$$

В работе [7] этот интеграл вычислен только для предельного случая $\beta_* L_V / \lambda_1 \rightarrow 0$ (так называемый кинетический режим роста кристаллов). Однако, методом разделения на простые дроби, этот интеграл можно взять в общем виде. Выполняя довольно трудоемкие технические преобразования, получим

$$t = -\frac{q^2}{\beta_* l_2} \left[\frac{r}{(r-1)^2} \ln \frac{r - \sqrt{z}}{\sqrt{z} + (r-3)\sqrt{z} + (r^2 - 3r + 3)} + \sqrt{3} \frac{r^2 - 3r + 2}{r-1} \left(\frac{2\sqrt{z} + r - 3}{\sqrt{3}(r-1)} - \frac{\pi}{6} \right) \right], \quad (15)$$

где $r = 1 + q(3\Delta\theta_0/l_2)^{1/3}$ — корень кубического уравнения

$$r^3 - 3r^2 + 3r - 1 - 3q^3 \Delta\theta_0 / l_2 = 0.$$

Таким образом, зависимость переохлаждения $\Delta\theta$ от времени t полностью определена уравнениями (13) и (15) в параметрическом виде: $\Delta\theta = \Delta\theta(z)$ и $t = t(z)$ ($z > 1$).

МОДЕЛЬ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ С ДВУХФАЗНОЙ ЗОНОЙ

Рассмотрим установившийся процесс направленного затвердевания вдоль оси z , стационарный в движущейся системе координат, связанной с двухфазной зоной. Границы зоны с кристаллом и расплавом движутся с постоянной скоростью V . Поверхность двухфазная зона—расплав, температура которой равна температуре фазового перехода, располагается в точке $z = 0$. Граница кристалл—двухфазная зона $z = -h$ (где h — ширина переохлажденной области) является неизвестной и определяется из решения задачи. Схематически изучаемый процесс представлен на рис. 1.

Дифференциальные уравнения тепломассопереноса в движущейся системе координат выглядят следующим образом [12–15]:

$$\frac{d}{dz} \left(\lambda \frac{d\theta}{dz} \right) - VL_V \frac{d\varphi}{dz} = 0, \quad (16)$$

$$-V \frac{d}{dz} ((1 - \varphi)\rho) = \frac{d}{dz} \left(\rho \frac{dz}{dz} \right) + k\sigma V \frac{d\theta}{dz}, \quad (17)$$

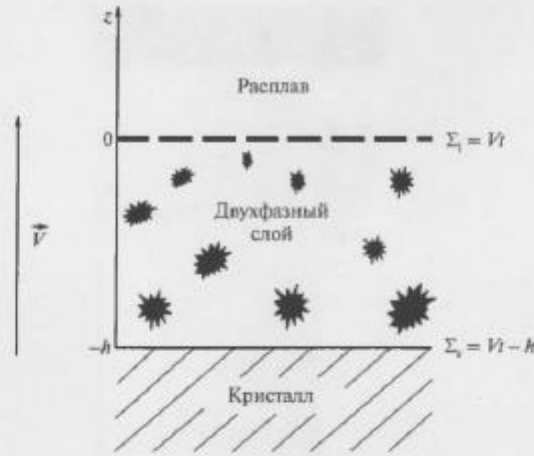


Рис. 1. Схема процесса направленного затвердевания с неравновесной двухфазной зоной.

где σ – концентрация примеси, V – скорость кристаллизации, φ – доля твердой фазы, k – коэффициент распределения примеси. Коэффициенты переноса λ и D задаются соотношениями:

$$\lambda(\varphi) = \lambda_1(1 - \varphi) + \lambda_2\varphi, \quad D(\varphi) = D_1(1 - \varphi),$$

где D_1 – коэффициент диффузии примеси в жидкости. Здесь считается, что число Льюиса $Le = a/D \gg 1$ (a – коэффициент температуропроводности). Температурные поля в кристалле и расплаве описываются постоянными температурными градиентами g_s и g_l . Границы двухфазной зоны с расплавом и кристаллом $z = 0$ и $z = -h$ определяются условием равенства температур локальным температурам ликвидуса, т.е. концентрационное переохлаждение на них равно нулю. Кроме этого, на них выполняются стандартные условия баланса тепла и массы

$$\varphi = 0, \quad \theta = \theta_p, \quad \sigma = \sigma_1, \quad z = 0,$$

$$\lambda_s n \cdot \nabla \theta = \lambda_l n \cdot \nabla \theta, \quad Dn \cdot \nabla \sigma = D_1 n \cdot \nabla \sigma_1, \quad z = 0,$$

$$\theta = \theta_p, \quad \lambda_s n \cdot \nabla \theta_s - \lambda_l n \cdot \nabla \theta = L_V(1 - \varphi) \frac{d\Sigma_1}{d\tau}, \quad z = -h,$$

$$Dn \cdot \nabla \sigma + (1 - k)(1 - \varphi)\sigma \frac{d\Sigma_2}{d\tau} = 0, \quad z = -h,$$

где Σ_s – координата границы твердая фаза – двухфазная зона, а нижние индексы s и l соответственно обозначают величины в твердой и жидкой фазах. Скорость кристаллизации V определяется так же, как и в работе [15]

$$V = \frac{\lambda_2 g_s - \lambda_1 g_l}{L_V}.$$

Таким образом, она совпадает со значениями, полученными для затвердевания с равновесной двухфазной зоной и фронтальным режимом. Интегрируя уравнение (16),

учитывая непрерывность температурного градиента и условие $\varphi = 0$ на границе двухфазная зона – расплав, получаем

$$\lambda(\varphi) \frac{d\theta}{dz} - VL_V \varphi = \lambda_1 g_1. \quad (18)$$

Далее будем использовать уравнение Шейла вместо соотношения (17) для описания распределения примеси в двухфазной зоне [16]:

$$\sigma = \frac{\sigma_1}{(1 - \varphi)^{1-k}}, \quad (19)$$

где σ_1 – концентрация примеси в расплаве. Формула (19) неоднократно приводилась различными авторами (см., например, [16, 17]); она также известна как правило неравновесного рычага. Уравнение (19) хорошо описывает перераспределение растворенного компонента в растущем кристалле и расплаве для широкого диапазона экспериментальных условий [2]. Уравнение Шейла рассматривается как простейшее приближение, учитывающее эффект накопления примеси перед фронтом затвердевания, который играет ключевую роль в развитии переохлаждения. Математически этот закон может быть получен интегрированием уравнения (17) при условии $D = 0$.

Для описания кинетических механизмов зарождения и роста элементов твердой фазы в двухфазной зоне, применим использованные выше предположения и соотношения. Скорости нуклеации и роста кристаллов задаются уравнениями (1) и (2), а функция плотности распределения кристаллов по размерам удовлетворяет дифференциальному уравнению (3) с граничным условием (6). Радиус критических зародышей по-прежнему принимается нулевым. Перепишав постановку задачи в квазистационарной системе координат, движущейся со скоростью V , получаем

$$-(1 + qr) \frac{dr}{dz} = \frac{\beta_*}{V} \Delta\theta, \quad (20)$$

$$-\frac{\partial f}{\partial z} + \frac{\beta_*}{V} \Delta\theta \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{f}{1 + qr} \right) = 0, \quad (21)$$

$$f|_{r=0} = \frac{I_*}{\beta_* \Delta\theta} \exp\left(-\frac{P}{\Delta\theta^2}\right), \quad (22)$$

где $\Delta\theta = \theta_p(\sigma) - \theta$ – концентрационное переохлаждение, $q = \beta_* L_V / \lambda_1$, а функция $f = f(z, r)$ не зависит от времени. Для объемной доли шарообразных твердых кристаллов в двухфазной зоне имеем соотношение

$$\varphi = \int_0^\infty \frac{4\pi}{3} r^3 f(z, r) dr. \quad (23)$$

Еще раз подчеркнем, что приведенная кинетическая теория не учитывает механизмов роста кристаллов в результате их взаимодействия. Это означает, что общая доля твердых частиц в переохлажденной области должна быть достаточно мала (только тогда уравнения (20)–(22) правильно описывают процесс), т.е. φ должно быть меньше некоторого критического значения: $\varphi < \varphi_{cr}$. Таким образом, модель, описывающая процесс направленной кристаллизации с переохлажденной двухфазной зоной, полностью определена. Далее, перейдем к вопросу построения решений системы уравнений (18)–(23).

ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЕ В ДВУХФАЗНОЙ ЗОНЕ

Ключевой величиной, определяющей процессы в двухфазной зоне, является переохлаждение

$$\Delta\theta(z) = \theta_p(\sigma(z)) - \theta(z) = \theta_p^0 - m\sigma(z) - \theta(z),$$

где θ_p^0 – температура фазового перехода чистого вещества, m – наклон линии ликвидуса. Используя формулы (18) и (19), получаем следующее уравнение для функции переохлаждения:

$$-b_1 \frac{d}{dz} \Delta\theta = \frac{b_2 + \varphi}{b_3 + \varphi} + b_4 \frac{1}{(1-\varphi)^{2-k}} \frac{d\varphi}{dz}, \quad (24)$$

$$b_1 = \frac{\lambda_s - \lambda_l}{VL_V}, \quad b_2 = \frac{\lambda_l g_1}{VL_V}, \quad b_3 = \frac{\lambda_l}{\lambda_s - \lambda_l}, \quad b_4 = (1-k)m\sigma_1 \frac{\lambda_s - \lambda_l}{VL_V} \quad (25)$$

с граничными условиями $\Delta\theta(0) = \Delta\theta(-h) = 0$. Решение уравнения (21) с граничным условием (22) можно записать в виде

$$f = \left(1 + \beta_* \frac{L_V}{\lambda_l} r\right) \eta(x(z) - y(r)) H(x(z) - y(r)). \quad (26)$$

Здесь введены обозначения

$$x(z) = \frac{\rho_*}{V} \int_z^0 \Delta\theta(\xi) d\xi, \quad y(r) = \int_0^r \left(1 + \beta_* \frac{L_V}{\lambda_l} r\right) dr,$$

$$\eta(u) = \frac{I_*}{\beta_* \Delta\theta(u)} \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta(u)^2}\right).$$

Интегрируя уравнение (20) с граничным условием $r = 0$ при $z = \zeta$, находим

$$r = (\sqrt{1 + 2q(x(z) - x(\zeta))} - 1)/q. \quad (27)$$

Последнее соотношение определяет радиус $r(z)$ кристаллов, появившихся в точке двухфазной зоны с координатой $z = \zeta$. Далее, переходя в (23) от переменной интегрирования r к новой переменной ζ по формуле $x(\zeta) = x(z) - y(r)$ (при фиксированном значении z), получаем следующее выражение для доли φ твердых частиц в двухфазной зоне:

$$\varphi(z) = \frac{4\pi I_*}{3V} \int_z^0 w(z, \zeta) \exp(pS(\zeta)) d\zeta, \quad (28)$$

$$w(z, \zeta) = q^{-3} (\sqrt{1 + 2q(x(z) - x(\zeta))} - 1)^3, \quad S(\zeta) = -1/\Delta\theta(\zeta)^2.$$

Для вычисления интеграла в (27) используем метод Лапласа ($p \gg \Delta\theta^2$). Для его реализации необходимо определить точку максимального переохлаждения в двухфазной зоне. Приравняв к нулю производную $\Delta\theta'(z)$ в (24) и решая полученное дифференциальное уравнение для функции $\varphi(z)$, находим следующее условие для точки v максимального переохлаждения:

$$v = \Sigma(\varphi) = -\frac{b_4}{1-k} \frac{1}{(1-\varphi)^{1-k}} \left[1 + \frac{b_3 - b_2}{b_2 - 1} F\left(k-1, 1, k; \frac{1-\varphi}{b_2-1}\right) \right] + \frac{b_4}{1-k} \left[1 + \frac{b_3 - b_2}{b_2 - 1} F\left(k-1, 1, k; \frac{1}{b_2-1}\right) \right], \quad (29)$$

где $F(\alpha, \beta, \gamma; x) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\alpha)_k (\beta)_k}{(\gamma)_k} \frac{x^k}{k!}$ – гипергеометрическая функция [18]. Учитывая главный член асимптотического разложения интеграла в (27), получаем (см. [11])

$$\varphi(z) = a(v) \cdot w(z, v), \quad (30)$$

$$a(v) = \frac{4\pi I_*}{3V} \sqrt{\frac{\pi \Delta\theta^3(v)}{\rho \Delta\theta''(v)}} \exp\left(-\frac{p}{\Delta\theta^2(v)}\right).$$

Из уравнения (29) следует, что $\varphi(v)$ приблизительно равно нулю ($w(v, v) = 0$). Так как функция $\varphi(z)$ убывает (это легко проверить дифференцируя уравнение (27)), то $\varphi(z) \approx 0$ на всем промежутке $v < z \leq 0$. Строго говоря, $\varphi(z) < 0$ при $v < z < 0$. Однако, исходя из физического смысла φ и приближенности метода Лапласа, следует, что $\varphi(z) \sim 0$ на этом интервале. Используя эту аппроксимацию в уравнении (24), находим

$$\Delta\theta(z) = -g_1 z, \quad v < z < 0. \quad (31)$$

Подставляя полученное линейное приближение для переохлаждения (30) в уравнение (27) при $z = v$, находим значение функции φ в точке v :

$$\varphi(v) = \frac{4\pi I_*}{3V} \int_v^0 \left(\sqrt{\frac{1}{q^2} + \frac{g_1 \beta_*}{qV} (v^2 - \xi^2)} - \frac{1}{q} \right)^3 \exp\left(-\frac{p}{g_1^2 \xi^2}\right) d\xi,$$

Наконец, подставляя $\varphi(v)$ в (28), получаем трансцендентное уравнение

$$v = \Sigma(\varphi(v)), \quad (32)$$

нетривиальное решение которого определяет точку v максимального переохлаждения в двухфазной зоне. Выражение для $a(v)$ содержит в знаменателе величину $\Delta\theta''(v)$, но из (30) следует, что $\Delta\theta''(v) = 0$. Для устранения этого противоречия необходимо еще раз вычислить интеграл в (27) методом Лапласа на промежутке $-h < z \leq v$, используя формулу для граничной максимальной точки $z = v$ (см. [11]). В результате будем иметь выражение для φ :

$$\varphi(z) = b(v) \cdot w(z, v), \quad b(v) = -\frac{4\pi I_*}{3V} \frac{v^3}{2p} g_1^2 \exp\left(-\frac{p}{(g_1 v)^2}\right).$$

Таким образом, функция объемной доли твердых частиц в двухфазной зоне полностью определена:

$$\varphi(z) = \begin{cases} 0 & v \leq z \leq 0, \\ b(v) \cdot w(z, v) & -h < z \leq v. \end{cases} \quad (33)$$

Перейдем в уравнении (24) к новой переменной x_v по формулам

$$\begin{aligned} x_v &= x(z) - x(v) = \frac{\beta_*}{V} \int_z^v \Delta\theta(\xi) d\xi, \\ \frac{d}{dz} &= \frac{dx_v}{dz} \frac{d}{dx_v} = -\frac{\beta_*}{V} \Delta\theta \frac{d}{dx_v}. \end{aligned} \quad (34)$$

В результате, для поля переохлаждения в области $-h < z < v$, получим следующее соотношение:

$$\Delta\theta(x_v) \cdot \Delta\theta'(x_v) = -c_1 \frac{1}{(1-\varphi)^{2-k}} \frac{d\varphi}{dx_v} \cdot \Delta\theta(x_v) + c_2 \frac{b_2 + \varphi}{b_3 + \varphi}, \quad (35)$$

$$c_1 = b_4/b_1, \quad c_2 = V/(\beta_* b_1), \quad \varphi = \varphi(x_v) = b w(x_v),$$

$$w(x_v) = (\sqrt{1 + 2qx_v} - 1)^3 / q^3.$$

Изменению z от v до $-h$ соответствует изменение параметра x_v от 0 до некоторого значения x_h . В точке $x_v = 0$ ($z = v$) из формулы (30) определяем граничное условие $\Delta\theta(0) = -g_1 v$ для уравнения (34). Таким образом, задача с подвижными границами сведена к решению дифференциального уравнения (34) абелевского типа с заданным граничным условием (т.е. к задаче Коши). Это уравнение легко интегрируется численными методами.

Ширина h двухфазной зоны находится из условия равенства температуры вещества на границе с кристаллом температуре ликвидуса, т.е. $\Delta\theta(x_h) = 0$. Подставляя это условие в уравнение (34), получаем выражение

$$(b_2 + \varphi)/(b_3 + \varphi) = 0,$$

которое не выполняется ни при каких значениях физических параметров ($\varphi > 0$, $b_2 > 0$, $b_3 > 0$). Это противоречие может быть устранено только предположением $\varphi = 1$ при $x_v = x_h$, т.е. на границе с кристаллом все вещество двухфазной зоны переходит в твердое состояние. Этот факт вполне согласуется с теорией объемной кристаллизации, предположения которой относительно кинетики роста кристаллов были использованы для развития рассматриваемого подхода. Следовательно, значение параметра x_h легко определяется из условия $b w(x_h) = 1$:

$$x_h = \frac{1}{2q} ((b^{-1/3} q + 1)^2 - 1). \quad (36)$$

Зависимость пространственной координаты z от параметра x_v определяется из (33):

$$z = z(x_v) = v - \frac{V}{\beta_*} \int_0^{x_v} \frac{d\xi}{\Delta\theta(\xi)}. \quad (37)$$

Таким образом, концентрационное переохлаждение в двухфазной зоне полностью определено. Зависимость $\Delta\theta(z)$ на промежутке $v < z \leq 0$ дается формулой (30), а на промежутке $-h < z < v$ задается параметрически $\Delta\theta = \Delta\theta(x_v)$, $z = z(x_v)$ уравнениями (34) и (36), где параметр x_v изменяется от 0 до x_h .

На рис. 2 построена зависимость переохлаждения $\Delta\theta$ от пространственной координаты z согласно полученным формулам. У границы с расплавом ($v < z < 0$), где $\varphi \approx 0$, т.е. зарождение и рост кристаллов практически отсутствуют, переохлаждение возрастает по линейному закону (здесь имеется в виду возрастание не по переменной z , а возрастание по мере продвижения в глубь двухфазной зоны от границы с расплавом). Когда система достигает максимального переохлаждения, в ней начинают интенсивно расти элементы твердой фазы, которые достаточно быстро снимают переохлаждение благодаря выделению скрытой теплоты кристаллизации. В результате, переохлаждение довольно быстро падает до значения, близкого к нулю, и, затем в значительной части двухфазной зоны медленно приближается к нулю. В работе [13] приведены экс-

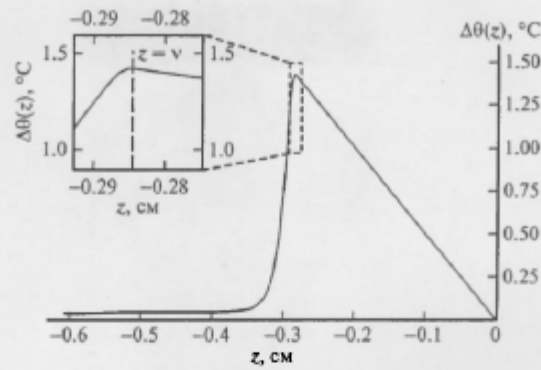


Рис. 2. Зависимость переохлаждения в двухфазной зоне от пространственной координаты согласно формулам (30), (34) и (36). Использованы значения параметров: $b_1 = 0.2 \text{ см } (^{\circ}\text{C})^{-1}$, $b_2 = 2$, $b_3 = 2$, $b_4 = 5.4 \text{ см}$, $k = 0.1$, $q = 5 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$, $p = 10 (^{\circ}\text{C})^2$, $\beta_{\text{ж}}/V = 2 \cdot 10^4 (^{\circ}\text{C})^{-1}$, $I_{\text{ж}}/V = 2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-4}$.

периментальные данные, полученные для неравновесного затвердевания в различных системах. Теоретическая (рис. 2) и экспериментальная (работа [13]) кривые имеют одинаковую характерную структуру: быстрое линейное возрастание с убыванием z от границы с расплавом $z = 0$, достижение максимума и последующее спадание до нуля. Это позволяет говорить о том, что развиваемая теория вполне адекватно описывает процесс затвердевания.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 3 представлена функция $\varphi(z)$, согласно формуле (32). Хорошо видно сложное поведение этой зависимости по сравнению со случаем квазиравновесной двухфазной зоны (например, наличие точки перегиба, показанное на врезке к рис. 3). Также заметно, что значение φ приближается к единице по мере продвижения в глубь зоны (аналитически этот факт показан при выводе уравнения (35)). Рассмотрим уравнение (19) для концентрации примеси. На первый взгляд, видно явное противоречие: при $\varphi \rightarrow 1$ имеем $\sigma \rightarrow \infty$, чего не может быть в реальной системе. Для объяснения этого факта обратим внимание на то, что формула (19) описывает поле концентрации по жидкой фазе двухфазной зоны. Это значит, что количество примеси в жидком веществе любой точки зоны равно $\Sigma = (1 - \varphi) \cdot \sigma = \sigma_0 \cdot (1 - \varphi)^k$.

Следовательно, если φ обращается в единицу, то общее количество примеси в расплаве не становится бесконечно большим, а наоборот, — стремится к нулю. Последнее вполне естественно: количество вещества в нулевом объеме равно нулю.

С математической точки зрения исследуемая задача полностью решена. Однако, как было отмечено выше, использованная здесь кинетическая теория зарождения и роста кристаллов, действует лишь при определенных значениях φ , которые не могут превышать некоторой критической величины $\varphi_{\text{кр}} < 1$. Это означает, что построенные решения могут применяться только при значениях z , больших некоторого $z_{\text{кр}}$, соответствующего $\varphi_{\text{кр}}$. Для описания поведения системы при $-h < z < z_{\text{кр}}$ необходимо рассматривать кинетическую теорию роста частиц, которая будет учитывать механизмы агломерации и перегонки, играющие преобладающую роль на поздних стадиях объемной кристаллизации расплава [7]. Можно пойти и другим путем для изучения системы

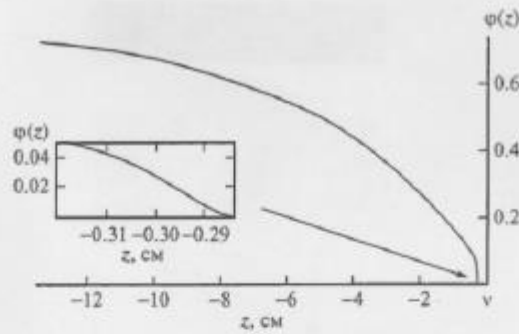
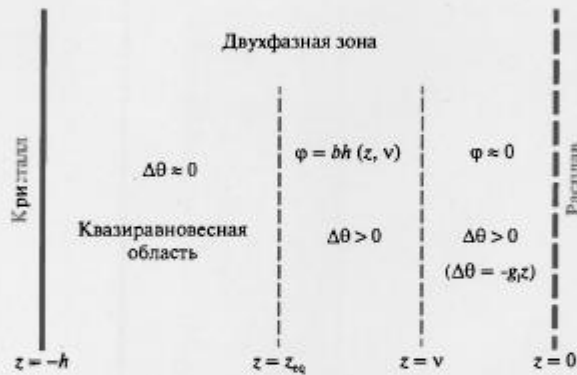
Рис. 3. Объемная доля $\varphi(z)$ кристаллов в двухфазной зоне ($v = -0.28$ см).

Рис. 4. Структура неравновесной двухфазной зоны.

при $z < z_{cr}$. Вместо рассмотрения такой сложной кинетической теории достаточно применить хорошо изученную теорию квазиравновесной двухфазной зоны, в которой пренебрегается переохлаждением [12–14]. Правомочность применения этой теории следует из того факта, что величина переохлаждения $\Delta\theta$ близка к нулю начиная с некоторого значения $z = z_{eq}$ (см. рис. 2, $z_{eq} \sim -0.35$ см.).

Таким образом, можно условно разделить неравновесную двухфазную зону на две области (рис. 4). В первой из этих областей, прилегающей к расплаву ($z_{eq} < z < 0$), переохлаждение существенно отлично от нуля. Во второй, граничащей с кристаллом ($-h \leq z < z_{eq}$), переохлаждение практически снято скрытой теплотой затвердевания, выделяющейся при росте частиц твердой фазы. Поэтому к этой области можно применить квазиравновесную теорию. В свою очередь, первую область можно тоже разделить на два региона (рис. 4). В области, прилегающей к расплаву ($v < z < 0$), элементы твердой фазы практически отсутствуют — их объемная доля близка к нулю. За счет этого там происходит рост переохлаждения по линейному закону (30). Во втором ре-

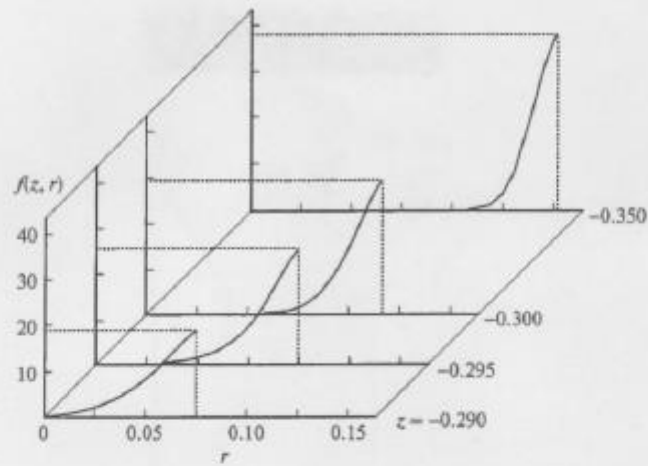


Рис. 5. Функция $f(z, r)$ (см^{-4}) плотности распределения кристаллов по размерам в зависимости от радиусов кристаллов r (см) в различных точках двухфазной зоны: $z = -0.29, -0.295, -0.3$ и $z = -0.35$ см .

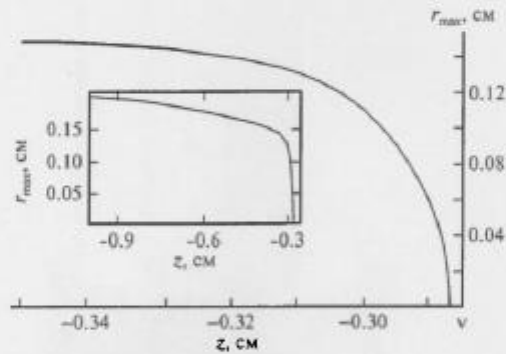


Рис. 6. Зависимость радиусов максимальных кристаллов от пространственной координаты.

гионе ($z_{\text{eq}} < z \leq v$) начинается интенсивный рост частиц новой фазы, которые достаточно быстро снимают переохлаждение (рис. 2).

В заключение, продемонстрируем эволюцию функции плотности распределения твердых частиц по размерам в двухфазной зоне. На рис. 5 построены графики функции $f(z, r)$ в точках $z = -0.29; -0.295, -0.3$ и $z = -0.35$ см . Видно, что при движении в глубь зоны (от расплава), средний и максимальный радиусы кристаллов возрастают. Причем кристаллов с меньшими радиусами становится меньше. Значения максимальных радиусов кристаллов в каждой точке зоны могут быть легко определены. Для этого достаточно приравнять к нулю аргумент функции Хевисайда в (25) и решить получившееся квадратное уравнение. Сделав это, найдем

$$r_{\text{max}} = (\sqrt{1 + 2qx_v} - 1)/q.$$

Например, в точке $z = -0.29$ см. значение $r_{\max} \approx 0.08$ см, при $z = -0.295$ см имеем $r_{\max} \approx 0.1$ см, при $z = -0.3$ см величина $r_{\max} \approx 0.12$ см и при $z = -0.35$ см значение $r_{\max} \approx 0.15$ см. На рис. 6 показана зависимость r_{\max} от пространственной координаты z . Видно, что с уменьшением переохлаждения по мере продвижения в глубь двухфазной зоны от границы с расплавом скорость увеличения максимальных радиусов уменьшается. Последнее особенно хорошо видно на врезке рис. 6 при $z < z_{\text{eq}}$, где значение переохлаждения близко к нулю (см. рис. 2) Радиус r_{\max} возрастает гораздо медленнее, чем на участке $z_{\text{eq}} < z < v$, где функция растет довольно резко (как и ранее, имеется в виду возрастание не по координате z а по расстоянию от границы с расплавом). Этот результат следует непосредственно из уравнения (20), из которого видно, что скорость роста частицы прямо пропорциональна значению переохлаждения $\Delta\theta$ и обратно пропорциональна ее радиусу.

Полученные соотношения позволяют также вычислить количество кристаллов в различных участках зоны. По определению функции f — количество частиц с размерами от r до $r + dr$ в точке z равно $f(z, r)dr$. Для определения полного числа твердых частиц в точке z , нужно проинтегрировать это соотношение по всем возможным размерам кристаллов. Тогда полное число кристаллов на участке $z_1 < z < z_2$ выразится интегралом

$$\int_{z_1}^{z_2} \int_0^{r_{\max}(x_v)} (1 + qr)\eta(x_v - r - qr^2/2)drdx_v,$$

где значениям параметров x_1 и x_2 соответствуют, согласно уравнению (36), координаты $z_1 = z(x_1)$ и $z_2 = z(x_2)$. Таким образом, на участке $-0.35 \leq z \leq v$ содержится около 260 кристаллов различных размеров (напомним, что, согласно развиваемой теории, на интервале $v < z < 0$ твердые частицы отсутствуют).

ВЫВОДЫ

В настоящей работе проведено исследование процесса кристаллизации бинарного расплава с неравновесной двухфазной зоной концентрационного переохлаждения. Двухфазная зона моделировалась как взвесь сферических твердых кристаллов, растущих в переохлажденном расплаве. Такой подход позволил использовать при решении задачи математический аппарат теории объемной кристаллизации. Сформулируем основные результаты:

1. Развита теория объемной кристаллизации переохлажденного расплава. В этой теории впервые удалось вывести общую формулу, описывающую зависимость переохлаждения от времени (уравнения (13) и (15)). Ранее такая зависимость была найдена только для предельного случая.

2. Сформулирована квазистационарная модель процесса кристаллизации, которая включает в себя кинетические механизмы, отвечающие за нуклеацию и рост кристаллов в области концентрационного переохлаждения. В эту модель введены физически оправданные упрощения, позволившие в дальнейшем получить аналитический вид решений.

3. Найдены выражения для функций, описывающих плотность распределения кристаллов по размерам (уравнение (25) и рис. 5) и их объемную долю в двухфазном слое (уравнение (32) и рис. 3). Вычислены радиусы наибольших частиц в зоне и определено общее число кристаллов в системе.

4. Получено и решено численно дифференциальное уравнение для ключевой характеристики двухфазной зоны — концентрационного переохлаждения. Построена зависимость переохлаждения от пространственной координаты. Показано, что пере-

охлаждение существенно в узкой области (пограничном слое) зоны, граничащей с расплавом (рис. 2 и 4). В другой области, прилегающей к кристаллу, переохлаждение почти снимается растущими элементами твердой фазы, поэтому этот участок можно описать квазиравновесной теорией.

5. Обнаружено, что в переохлажденном регионе существуют две области с принципиально разным поведением переохлаждения (рис. 4). В первой области, прилегающей к расплаву, нуклеация и рост кристаллов проходят крайне медленно. Поэтому их влияние на процесс, и в частности, на переохлаждение, не существенно. Благодаря этому последнее возрастает по линейному закону (30). Во второй области эти явления играют важную роль и отвечают за снятие переохлаждения перед фронтом затвердевания. Описанная структура двухфазной зоны хорошо согласуется с экспериментальными данными.

6. В работе определены рамки применимости модели. Указано на невозможность применения используемой кинетической теории роста частиц для описания всей двухфазной зоны (теория не работает при больших значениях объемной доли твердой фазы), а также даны некоторые рекомендации, позволяющие адаптировать рассматриваемую модель для всей переохлажденной области.

В заключение можно отметить, что проведенные исследования позволили определить ряд новых нелинейных свойств двухфазной зоны, которые невозможно описать в рамках классической квазиравновесной теории. Кроме этого, в работе удалось построить три новых аналитических решения нелинейной задачи о направленной кристаллизации с двухфазной зоной.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 08-01-00298, 09-08-00844, 10-03-00338) и ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009–2013 годы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Volmer M., Weber A. Keimbildung in übersättigten Gebilden. — *Z. Phys. Chem.*, 1926, **A119**, p. 277–301.
2. Флемингс М. Процессы затвердевания. — М.: Мир, 1977. — 423 с.
3. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. — Л.: Изд-во АН СССР, 1945.
4. Зельдович Я. Б. К теории образования новой фазы. — *ЖЭТФ*, 1942, **12**, с. 525–536.
5. Гиббс Д. В. Термодинамика и статистическая механика. — М.: Наука, 1982. — 584 с.
6. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979. — 528 с.
7. Buyevich Yu. A., Alexandrov D. V., Mansurov V. V. Macrokinetics of crystallization. — New-York – Wallingford: Begell House, 2001. — 183 p.
8. Авдонин Н. А. Математическое описание процессов кристаллизации. — Рига.: Зинатне, 1980. — 178 с.
9. Buyevich Yu. A., Mansurov V. V. Kinetics of the intermediate stage of phase transition in batch crystallization. — *J. Crystal Growth*, 1990, **104**, p. 861–867.
10. Чернов А. А., Гиваргизов Е. И., Багдасаров Х. С. и др. Современная кристаллография. Т. 3. Процессы кристаллизации. — М.: Наука, 1980. — 408 с.
11. Федорюк М. В. Асимптотика, интегралы и ряды. — М.: Наука, 1987. — 544 с.
12. Worster M. G. Solidification of an alloy from a cooled boundary. — *J. Fluid Mech.*, 1986, **167**, p. 481–501.
13. Борисов В. Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Металлургия, 1987. — 224 с.
14. Hillis R. N., Loper D. E., Roberts P. H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone. — *Q. J. Mech. Appl. Math.*, 1983, **36**, p. 505–539.

15. Alexandrov D. V. Solidification with a quasiequilibrium mushy region: analytical solution of nonlinear model. — *J. Crystal Growth*, 2001, **222**, p. 816–821.
16. Kerr R. C., Woods A. W., Worster M. G., Huppert H. E. Solidification of an alloy cooled from above. Part 1. Equilibrium growth. — *J. Fluid Mech.*, 1990, **216**, p. 323–342.
17. Scheil E. Bemerkungen zur schichtkristallbildung. — *Zeichrift fur Metallkunde*, 1942, **34**, p. 70–72.
18. Зайцев В. Ф., Полянин А. Д. Справочник: обыкновенные дифференциальные уравнения. — М.: Физматлит, 2001. — 576 с.

Уральский государственный
университет им. А. М. Горького

Поступила в редакцию
12 апреля 2010 г.
Екатеринбург

SOLIDS AND LIQUIDS

Convective Instability of Solidification with a Phase Transition Zone

D. V. Alexandrov and A. P. Malugin

Gorkiy Ural State University, pr. Lenina 51, Yekaterinburg, 620083 Russia

e-mail: Alexey.Malugin@usu.ru

Received April 3, 2010; in final form, November 3, 2010

Abstract—The morphological instability of solidification is analytically studied in the presence of an anisotropic and heterogeneous phase transition zone with allowance for a liquid flow and convective heat-and-mass transfer in this two-phase zone. The mechanism of breaking the stability of solidification is considered; it consists in a convective heat and impurity transfer during a liquid flow along channels in the phase transition zone. The morphological instability is subjected to linear analysis with allowance for a liquid flow in the liquid phase of the system, impurity diffusion in the two-phase zone, and the dependence of the transfer coefficients on the phase composition. The perturbation evolution parameter is determined for an anisotropic and heterogeneous two-phase zone, and neutral stability curves of the process are obtained. It is shown that taking into account impurity diffusion and an increase in the heterogeneity of the phase transition zone broaden the instability region and that a decrease in the anisotropy narrows this region. A new criterion of convective morphological instability of solidification with a two-phase zone is found, and it substantially broadens the instability region when the liquid flow velocity increases.

DOI: 10.1134/S1063776111090010

1. INTRODUCTION

The works dealing with hydrodynamic instability started in the 1920s. The first example of a laminar liquid flow that becomes unstable under certain conditions was given in [1]. The appearance of instability is responsible for breaking a certain liquid flow mode and leads to the formation of a new flow mode when the system parameters controlling the process change. The stability of the problems of heat and mass transfer with Stefan-type mobile boundaries was first studied in classical work [2] using the linear theory of hydrodynamic instability [3]. The authors of [2] investigated the morphological instability of a plane solid/liquid interface, i.e., solidification front, to small perturbations of its shape. The Mullins–Sekerka instability criterion is reduced to the inequality

$$(k_l + k_s)^{-1} \left[k_l \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{h^+} + k_s \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{h^-} \right] < -m \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{h^+}, \quad (1)$$

where T is the temperature; C is the impurity concentration; m is the liquidus line slope; k_l and k_s are the heat-transfer coefficients in the liquid and solid phases, respectively; h is the solidification front coordinate; and “+” and “−” correspond to the liquid and solid phase (coordinate axis directions are given in Fig. 1), respectively.

The rejection of an impurity by a plane crystal/melt interface toward the volume of the liquid phase and its accumulation before the front result in a concentra-

tion supercooling. The condition of its formation obtained in [4] has the form

$$\left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{h^+} < -m \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{h^+}. \quad (2)$$

The concentration supercooling creates preferred conditions for the growth of individual projections of the solid phase toward the liquid and, thus, leads to instability of the plane interface and the nucleation of an extended phase transition zone.

In practice, inequalities (1) and (2) do not generate substantially different relationships, and it is impossible to determine which of them represents a more accurate instability criterion [5]. Nevertheless, inequality (2) is based on the physical mechanism of instability development, whereas inequality (1) simply follows from a linear instability theory. From a physical viewpoint, a supercooling should precede instability and cause its

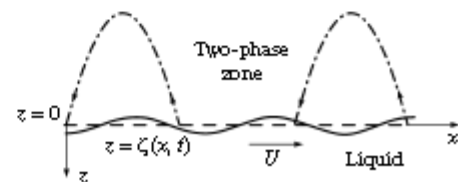


Fig. 1. Schematic diagram of solidification: (dashed line) position of the interface in equilibrium and (dot-and-dash curves) liquid flow in channels.

development [6]. Therefore, it is reasonable to use inequality (2) as an instability criterion [7].

The instability development leads to the formation of various growth structures of the solid phase (e.g., cells) at the solidification front, and a linear analysis apparatus is used to calculate the structure element size near a neutral stability curve [8].

Generally speaking, it is incorrectly to use the classical Stefan model with a plane front when inequality (1) or (2) is satisfied: it is necessary to apply a two-zone theory. Since the latent heat that releases during the solidification of liquid in the phase transition region often compensates for the concentration supercooling, one can neglect nucleation and kinetics processes in the two-phase layer and can use the quasi-equilibrium theory from [6, 9]. When studying various nonstationary solidification conditions, the authors of [7, 10–12] showed that condition (2) is met rather rapidly and that solidification then proceeds in the presence of an extended phase transition zone. In other words, a frontal interface exists usually either at the very beginning of solidification or in a narrow range of the system parameters. In all other cases, a phase transition takes place in a rather wide spatial layer. The freezing of sea water accompanied by the formation of ice brash is a well-known example.

During two-phase zone solidification, different types of instabilities are responsible for the formation of different types of non uniform impurity distributions and interface irregularities, as in the case of the frontal solidification mode. Morphological and dynamic instabilities are distinguished. In contrast to longitudinal lamination, which appears as a result of morphological instability of a plane front with respect to a sinusoidal perturbation with a nonzero wavenumber, transverse lamination results from dynamic instability with respect to perturbations with a zeroth wavenumber (such perturbations are most dangerous, rapidly growing). In other words, the dynamic instability is considered to be instability with respect to solidification rate perturbations at a retained shape of the solidification front or the two-phase zone.

In solidification with an extended phase transition region, the fraction of the solid phase at the interface between the two-phase zone and the liquid phase is often nonzero [7, 13, 14]; therefore, morphological instability of this interface can also takes place in such systems (as in the case of a plane front). Experimental data [15, 16] and a numerical simulation [17] demonstrate that liquid flows in a melt can result in the formation of circulation flows along channels in the two-phase zone (the channels are taken to be ducts in the two-phase zone that are free of the solid phase and filled with the liquid). The experimental data demonstrate that, when the two-phase zone reaches a certain critical thickness h_c , the impurity concentration in the liquid increases strongly due to an impurity flow from the two-phase zone channels [15, 18]. When the temperature at the cooling boundary decreases, thickness

h_c and the quantity of impurity flowing to the liquid part of the system through the channels increase. The liquid mass rejected from the channels is replaced by the flow passing from the solution or melt to the two-phase zone. The channels can be caused by uniform growth instability and a local anisotropy in the phase transition region. Thus, closed stream lines covering the two-phase layer and the liquid part of the system appear.

The authors of [19] proposed a very simple model that describes the appearance of morphological instability in the boundary between the two-phase zone and a liquid. This model does not take into account the distribution and perturbation of the fraction of the solid phase and the impurity concentration in the phase transition region (impurity transport results in the two-phase zone). A model for instability with allowance for these distributions for an isotropic and homogeneous two-phase zone and with the use of a number of simplified hypotheses was developed in [20]. Below, we will show that, when diffusion processes, the distribution of the fraction of the solid phase, and the anisotropy and heterogeneity of the phase transition region are taken into account simultaneously, the morphological instability region (where channels and other types of heterogeneity develop) grows substantially (by several times).

Note that the density of the channels appearing in the two-phase zone can vary over wide limits, namely, from one channel per sample [18] to a network of channels spaced 1 cm apart [16]. The formation of such channels often takes place. These channels cause a nonuniform impurity distribution during the solidification of alloys [21], the deceleration of the ice growth rate in freezing of sea water [15], and the redistribution of mineral sediments during magma solidification [22]. They are assumed to occur at the boundary between the internal and external Earth cores [23]. Our analysis of the morphological instability can be applied to all such systems under quasi-equilibrium solidification conditions.

2. MORPHOLOGICAL INSTABILITY

The processes of heat and mass transfer in the phase transition region are described by the following convective heat conduction and impurity diffusion equations and a liquidus equation, which follows from the phase diagram of a system:

$$\rho_s c_m \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_s \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla (k_m \nabla T) + \rho_s L \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (3)$$

$$(1 - \varphi) \frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = \nabla (D_m \nabla C) + (1 - k) C \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (4)$$

$$T = T_* - mC, \quad (5)$$

where \mathbf{u} is the liquid velocity in channels; L is the latent heat of solidification; k is the impurity distribution coefficient; T_* is the phase transition temperature

of the pure substance; and ρ_s, c_s, k_s , and D_s are the density, specific heat, thermal conductivity and diffusion coefficient of the impurity, which depend on the fraction of the solid phase φ . The dependence of the transfer coefficients on the fraction of the solid phase is assumed to be linear, which was theoretically grounded in [24] for systems with a preferred new-phase growth direction (the case of directional solidification). Thus, the transfer coefficients in the two-phase zone are determined through the transfer coefficients in the solid and liquid phases according to the mixture rule [24],

$$\begin{aligned}\rho_s c_s &= \rho_l c_l (1 - \varphi) + \rho_s c_s \varphi, \\ k_s &= k_l (1 - \varphi) + k_s \varphi, \quad D_s = D_l (1 - \varphi),\end{aligned}\quad (6)$$

where subscripts s and l indicate the values determined for the solid and liquid phases (impurity diffusion in the solid phase is neglected), respectively. It should be noted that any real dependence of these coefficients should be linearized in performing a linear analysis of the stability.

The liquid flow in the channels of the two-phase zone is described with the Darcy equation written for a porous medium,

$$\mu \mathbf{u} = \Pi \cdot (\rho \mathbf{g} - \nabla p) = -\Pi \cdot \nabla p, \quad (7)$$

where p is the pressure, μ is the dynamic viscosity coefficient, \mathbf{g} is the free fall acceleration, and $\Pi = \Pi(\varphi)$ is the penetrability tensor of the two-phase zone (which depends on the fraction of the solid phase φ). Note that Eq. (7) can be applied if the Reynolds number is $Re \leq S$, where S is the number lying in the range 3–10 [25]. The penetrabilities in the horizontal (Π_h) and vertical (Π_v) directions are related through an anisotropy coefficient $0 \leq \beta \leq 1$, $\Pi_h = \beta^2 \Pi_v$ [19]. The change in the penetrability with the two-phase layer depth is caused by a temperature gradient. Following [19], we simulate this dependence as follows:

$$\Pi_v(z) = \Pi_v(0)e^{\gamma z}, \quad \Pi_h(z) = \beta^2 \Pi_v(z), \quad (8)$$

where γ is the nonuniformity parameter. Such a spatial distribution is supported experimentally [26].

The following heat and mass balance conditions are met at the boundary between the two-phase zone and the liquid:

$$\rho_s L \varphi_b V = k_s(\varphi_b) \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^-} - k_l \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{b^+}, \quad (9)$$

$$(1 - k) C_b \varphi_b V = D_s(\varphi_b) \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{b^-} - D_l \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{b^+}, \quad (10)$$

where V is the boundary velocity and subscript b designates a quantity at the boundary.

In equilibrium, the interface is assumed to be located at $z = 0$ (Fig. 1). A liquid flow at velocity U (which is caused by the motion of a medium or con-

vection) perturbs the interface and moves it to a new position,

$$z = \zeta(x, t) = \hat{\zeta} \exp(i\alpha x + \sigma t),$$

where $\hat{\zeta}$ is the perturbation amplitude and α and σ are the wavenumber and the perturbation growth rate parameter (instability parameter), respectively. We consider the situation where the flow in the region occupied by the liquid is vortex-free and the velocity potential satisfies the Laplace equation $\Delta \Phi = 0$ ($\mathbf{u} = \nabla \Phi$). We neglect the liquid flow velocity in the two-phase layer as compared to the liquid flow velocity in the region $z > 0$ and have no liquid leakage at the interface. Hence, we can write the velocity potential in the liquid as

$$\Phi = Ux - iU\zeta(x, t)e^{-\alpha z}. \quad (11)$$

The pressure at the interface that specifies a liquid flow along the channels of the phase transition region is determined from the Bernoulli equation with Eq. (11) and has the form

$$p = -\rho_l \alpha U^2 \zeta(x, t). \quad (12)$$

We now take into account continuity equation $\nabla \mathbf{u} = 0$ (the changes in the fraction of the solid phase in the channels of the two-phase zone are taken to be insignificant), use Eqs. (7) and (8), and find the equation

$$\beta^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \gamma \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0$$

for the pressure in the phase transition region. Its solution has the form

$$p = -\rho_l \alpha U^2 \zeta e^{\alpha z}, \quad q = -\frac{\gamma}{2} + \frac{\sqrt{\gamma^2 + 4\alpha^2 \beta^2}}{2}. \quad (13)$$

Expression (13) transforms into Eq. (12) in the plane $z = 0$.

The temperature field in the solid phase and the two-phase zone is usually taken as an almost linear function of the spatial coordinate (see, e.g., [13, 27, 28]), which is explained by the fact that the temperature relaxation time is several orders of magnitude shorter than all other characteristic times of the process (relaxation time of the diffusion field, characteristic time of interface displacement). Therefore, we have

$$T(x, z, t) = T_b + Gz + \hat{\theta}(z) \exp(i\alpha x + \sigma t),$$

where T_b is the temperature at the interface and G is the temperature gradient. The first two terms represent the temperature in the unperturbed state, and the third term characterizes perturbations. The impurity concentration is determined by Eq. (5). Temperature perturbation amplitude $\hat{\theta}$ is found from the system of Eqs. (3)–(5) with allowance for Eqs. (13) and (6) and the perturbed fraction of the solid phase

$$\varphi(z, t) = \varphi_0 + \Phi(z) \exp(i\alpha x + \sigma t)$$

(where φ_0 and Φ are the unperturbed value and the perturbation amplitude of the fraction of the solid

phase). Then, as an unperturbed approximation, we will use the stationary approximation ($\partial/\partial t \rightarrow 0$) grounded in [20]. We exclude the impurity concentration from the systems of Eqs. (3)–(5), perturb the modified equations with allowance for the terms linear in perturbations, eliminate φ_0 , and obtain the equation

$$\frac{d^2 \hat{\theta}}{dz^2} - \alpha^2 \hat{\theta}(z) = A e^{(q+\gamma)z}, \quad (14)$$

where

$$A = \left(1 + \frac{\kappa(K-1)}{KD_l}\right) \frac{\Pi_s(0)\alpha V^2 q G_s}{k_v},$$

$$\kappa = \frac{k_s}{\rho C_l}, \quad K = \frac{k_s}{k_l}, \quad \gamma = \frac{\mu}{\rho_l}$$

for finding amplitude $\hat{\theta}$. The solution to Eq. (14) has the form

$$\hat{\theta}(z) = -G_s e^{\alpha z} + \frac{A[e^{(q+\gamma)z} - e^{\alpha z}]}{(q+\gamma)^2 - \alpha^2}, \quad (15)$$

$$\beta \neq 1, \quad \gamma \neq 0$$

if we take into account the condition of limited amplitude $\hat{\theta}$ at $z \rightarrow -\infty$ and the known value at the interface ($\hat{\theta}(0) = -G_s$, which follows from the temperature distribution). For an isotropic ($\beta = 1$) and homogeneous ($\gamma = 0$) phase transition region, from Eq. (14) we have the solution

$$\hat{\theta}(z) = -G_s e^{\alpha z} + \frac{A}{2\alpha} z e^{\alpha z}, \quad \beta = 1, \quad \gamma = 0. \quad (16)$$

We now exclude fraction φ_0 from boundary conditions (9) and (10), use Eqs. (5) and (6), and obtain the boundary condition

$$\rho_s L V = k_s \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_s + \frac{(1-k)k_l(T_b - T_s)V}{D_l} \quad (17)$$

at the interface. In deriving this condition, we used the limiting equilibrium condition at the interface from the liquid [7],

$$-m \left(\frac{\partial C}{\partial z}\right)_s = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_s.$$

We perturb Eq. (17) near the equilibrium position $z = 0$, substitute the amplitudes from Eqs. (15) and (16), and obtain an equation for determining the instability parameter. We solve this equation for σ and finally find the following criterion of convective morphological instability:

$$\sigma = \alpha V \left(\frac{B}{q+\gamma+\alpha} - 1 \right) - \frac{(1-k)V^2}{KD_l},$$

$$\beta \neq 1, \quad \gamma \neq 0,$$

$$\sigma = \alpha V \left(\frac{B}{2\alpha} - 1 \right) - \frac{(1-k)V^2}{KD_l}, \quad (18)$$

$$\beta = 1, \quad \gamma = 0, \quad B = \frac{A}{\alpha G_s},$$

$$V = \frac{k_s G}{\rho_s L - (1-k)k_l(T_b - T_s)/D_l}.$$

One of the main controlling parameters is represented by the solidification rate, which is specified by the thermophysical properties of the system and the temperature gradient. Solidification rate V in a quasi-equilibrium process that is determined by the derived expression ranges from 10^{-7} cm/s for water-salt solutions to 10^{-5} cm/s for typical metallic melts (thermophysical parameters are given in [12–14]). The sign of parameter σ determines stability ($\sigma > 0$) and instability ($\sigma < 0$) regions.

We now dwell on the quasi-stationary approximation. Velocity V of the motion of the interface between the two-phase zone and the liquid is determined by temperature gradient G in the two-phase zone at any time. All other parameters in the expression for velocity V are considered to be constant. The time it takes for gradient G to change is on the order of b/V . For a zone thickness b of even several millimeters, this time is about 10^6 s for water solutions and supercoolings of several degrees Celsius and 10^4 s for metallic alloys and supercoolings of about one thousand degrees Celsius. Since characteristic times t_1 of external perturbations (the temperature field relaxation times or the hydrodynamic perturbation times, which are several seconds) are much shorter than the time $t_2 = b/V$ it takes for the interface velocity to change substantially, we can use a quasi-stationary approximation. Thus, the smallness of the t_1/t_2 ratio is the condition of application of a quasi-stationary approximation.

3. DISCUSSION OF RESULTS

Instability criterion (18) is the main result of our theory. Figure 2 shows that, allowing for impurity diffusion and the distribution of the fraction of the solid phase in the phase transition zone, the developed theory yields substantially different results as compared to the well-known criterion of [19]. The neutral stability $\sigma = 0$ curves differ more than twofold at the corresponding wavenumbers. From a physical viewpoint, this is explained by the fact that the impurity rejected during the growth of the solid phase increases the impurity concentration and decreases the phase transition temperature in some regions in the two-phase zone (which are filled with the liquid), which increases the heterogeneity of the structure–phase composition and represents a destabilizing factor. It is seen from Fig. 2a that a decrease in the anisotropy parameter leads to a broadening of the stability region, which is explained by a weakening of the convective transport in the phase transition zone. Figure 2b illustrates an increase in the heterogeneity parameter, which results

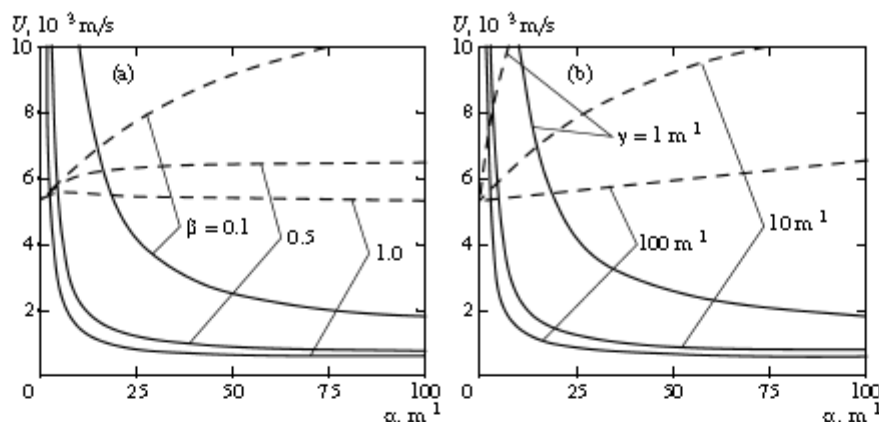


Fig. 2. Neutral stability curves for sea water at (a) various values of parameter β and $\gamma = 10 \text{ m}^{-1}$ and (b) various values of heterogeneity parameter γ at $\beta = 0.1$. Stability and instability regions are located below and above the corresponding curves. (solid curves) Calculation by Eq. 18 and (dashed curves) simplified model [19]; $\nu = 1.07 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, $\kappa = 1.33 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$, $D = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, $V = 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$, $\Pi_0(0) = 10^{-6} \text{ m}^2$, $K = 3.8$, and $k = 0$.

in a broadening of the instability region due to more intense heat-and-mass transfer.

Let us note several more specific features of criterion (18). An increase in kinematic viscosity ν leads to a decrease in parameter B and an increase in the negative contribution to the right-hand side of Eq. (18); that is, it shifts the process toward stability. The con-

verse effect is observed when liquid velocity U increases. At a fixed value of U a shift toward short-wavelength perturbations (which corresponds to large wavenumbers) brings the system into an unstable state, whereas the criterion in [19] gives the opposite situation (see Fig. 2). In other words, perturbations with small wavelengths more easily form various heterogeneities. Let us dwell on this point.

It can be expected that perturbations form heterogeneities of the order of their characteristic length and that a smaller heterogeneity size requires a smaller energy barrier to be overcome for heterogeneity formation. We now estimate the growth rate of the interface asperities that can cause liquid turbulization near the surface $z = 0$. For σ estimated at $10^{-5} - 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ in Eq. (18), we conclude that an asperity amplitude of 1 cm can grow severalfold in a few hours. To calculate the sizes of the appearing heterogeneous structures, we have to determine the perturbation amplitude, which can be done in terms of a nonlinear stability theory. Such an analysis, which can study the development of oscillation instability near the neutral stability curve, can be performed using the approach from [8].

As discussed above, the two-phase zone appears as a result of a concentration supercooling and the development of morphology instability in a plane front described in classical work [2]. In the absence of convection, the process can only include dynamic instability, which represents oscillations of the two-phase zone as a whole with a zero wavenumber. The stability of the phase transition zone to such oscillations, which grow as fast as possible, was studied in [29]. Figure 3 shows the perturbation growth parameter versus the solidification rate for the dynamic instability consid-

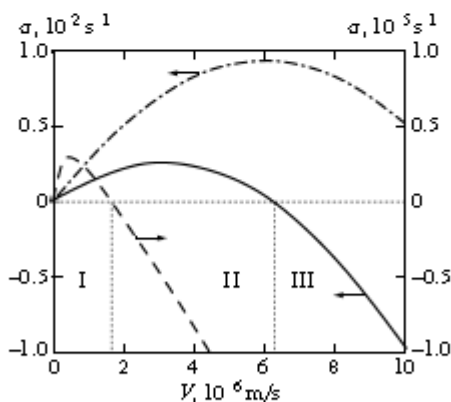


Fig. 3. Instability parameter vs. the solidification rate for sea water at $\alpha = 10 \text{ m}^{-1}$, $\beta = 0.5$, and $\gamma = 10 \text{ m}^{-1}$. (solid and dot-and-dash curves) Calculation by Eq. (18) at $U = 1.6 \times 10^{-2}$ and $2.2 \times 10^{-2} \text{ m/s}$, respectively. (dashed curve) Calculation by Eq. (38) from [29]. The points of intersection of the curves with the line $\sigma = 0$ indicate the passage through the neutral stability curve. Vertical lines separate the following three regions: (I) dynamic and convective instability, (II) dynamic stability and convective instability, and (III) dynamic and convective stability.

ered in [29] and for the convective morphological instability under study. A comparison of these curves demonstrates that the convective instability expands dynamic instability region I to convective instability region I + II. In this case, an increase in liquid flow velocity U broadens the instability region (Fig. 3, solid and dot-and-dash lines).

Let us again note that the solidification rate range used to illustrate the results is characteristic of a wide class of systems (as noted in Section 2, they range from 10^{-7} to 10^{-5} cm/s). Since a phase transition often proceeds in an extended zone, stability criterion (18) determines various regimes of such processes in the presence ($\sigma > 0$) or absence ($\sigma < 0$) of channels in it. The appearance of instability in geophysics is accompanied by the formation of asperities in the ice-ocean interface, which change the heat flow through the ice, and instability in metallurgy leads to the formation of a nonuniform impurity distribution and a rough ingot surface.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 08-01-00298) and the program Scientific and Scientific-Pedagogical Personnel of Innovation Russia (2009–2013).

REFERENCES

1. G. I. Taylor, *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A* 223, 289 (1923).
2. W. W. Mullins and R. F. Sekerka, *J. Appl. Phys.* 35, 444 (1964).
3. C. C. Lin, *The Theory of Hydrodynamic Stability* (Cambridge University Press, Cambridge, 1955).
4. G. P. Ivantsov, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 81, 179 (1951).
5. R. F. Sekerka, in *Crystal Growth: An Introduction*, Ed. by P. Hartman (North-Holland, Amsterdam, The Netherlands, 1973), p. 403.
6. R. N. Hills, D. E. Loper, and P. H. Roberts, *Q. J. Mech. Appl. Math.* 36, 305 (1983).
7. M. G. Worster, *J. Fluid Mech.* 167, 481 (1986).
8. D. J. Wollkind and L. A. Segel, *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A* 268, 351 (1970).
9. V. T. Borisov, *The Theory of a Two-Phase Zone of Metallic Ingots* (Metallurgiya, Moscow, 1987) [in Russian].
10. P. N. Vabishchevich, V. V. Mansurov and A. G. Churbanov, *Khim. Prom-st. (St. Petersburg)*, No. 10, 39 (1994).
11. D. V. Alexandrov, A. G. Churbanov, and P. N. Vabishchevich, *Int. J. Fluid Mech. Res.* 26, 248 (1999).
12. Yu. A. Buyevich, D. V. Alexandrov, and V. V. Mansurov, *Macrodynamics of Crystallization* (Begell House, New York, United States, 2001).
13. D. V. Alexandrov and A. P. Malygin, *Dokl. Akad. Nauk* 411 (3), 390 (2006) [*Dokl. Earth Sci.* 411 (2), 1407 (2006)].
14. D. V. Alexandrov, A. P. Malygin, and I. V. Alexandrova, *Ann. Glaciol.* 44, 118 (2006).
15. J. S. Wettlaufer, M. G. Worster, and H. E. Huppert, *Geophys. Res. Lett.* 24, 1251 (1997).
16. J. S. Wettlaufer, M. G. Worster, and H. E. Huppert, *J. Fluid Mech.* 344, 291 (1997).
17. T. P. Schulze and M. G. Worster, *J. Fluid Mech.* 388, 197 (1999).
18. M. I. Bergman, D. R. Fearn, J. Bloxham, and M. C. Shannon, *Metall. Mater. Trans. A* 28, 899 (1997).
19. D. L. Feltham, M. G. Worster, and J. S. Wettlaufer, *J. Geophys. Res.* 107, 3009 (2002).
20. D. L. Feltham and M. G. Worster, *J. Fluid Mech.* 391, 337 (1999).
21. A. Hellawell, J. R. Sarazin, and R. S. Steube, *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A* 345, 307 (1993).
22. S. Tait and C. Jaupart, *J. Geophys. Res.* 97, 6735 (1992).
23. M. I. Bergman and D. R. Fearn, *Geophys. Res. Lett.* 21, 477 (1994).
24. G. K. Batchelor, *Ann. Rev. Fluid Mech.* 6, 227 (1974).
25. P. Ya. Polubarinova-Kochina, *Theory of Ground Water Movement* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, United States, 1962; Nauka, Moscow, 1977).
26. N. Ono and T. Kasai, *Ann. Glaciol.* 6, 298 (1980).
27. S. Martin and P. Kauffman, *J. Fluid Mech.* 64, 307 (1974).
28. J. S. Wettlaufer, M. G. Worster, and H. E. Huppert, *J. Geophys. Res.* 105, 1123 (2000).
29. D. V. Alexandrov and A. O. Ivanov, *J. Cryst. Growth* 210, 797 (2000).

Translated by K. Shakhlevich

Заключение

Научные материалы, изложенные в отчете представляют собой единую теорию исследования нелинейных процессов направленной кристаллизации, протекающих при наличии зоны двухфазного состояния вещества в нестационарных условиях. Научные результаты третьего этапа основываются на результатах, полученных на первом и втором этапах и являются их развитием (как с точки зрения единой теории, так и с точки зрения плана проведения научных исследований). Основные результаты и научные выводы работы заключаются в следующем.

В работе рассмотрен рост изолированного дендрита в жидкую фазу системы при наличии в ней набегающего потока. Термодиффузионная модель процесса основана на стефановском приближении фронтальной границы между растущим кристаллом и окружающей его жидкостью и гидродинамических уравнениях Осеена. Из условия микроскопической разрешимости на основе линейного анализа устойчивости получен критерий устойчивого роста двумерного параболического дендрита с учетом анизотропии поверхностного натяжения на межфазной границе кристалл-расплав. Найденный критерий содержит ранее полученные критерии для роста изолированного дендрита в однокомпонентной среде с конвекцией жидкости и роста изолированного дендрита в неподвижной бинарной системе. Показано, что развиваемая теория справедлива при произвольных числах Рейнольдса и Пекле, определяемых скоростью набегающего на дендрит потока жидкости. Сделано обобщение теории на случай трехмерного дендритного роста.

Теория дендритного роста адаптирована для кристаллизации в двухфазной зоне трехкомпонентных систем. В основной области фазовый переход претерпевает основной компонент, а в котектической – два компонента. Разработан метод построения точных аналитических решений задачи в основной и котектической двухфазных зонах. Метод сводится к переходу в уравнениях и граничных условиях модели к новой независимой переменной – доле жидкой фазы. На основе разработанного метода получены точные аналитические решения нелинейной системы уравнений с пограничными условиями на неизвестных границах фазовых переходов. Найдены распределения температуры и концентраций примеси, доли твердой и жидкой фаз, скорость затвердевания и протяженности котектической и основной двухфазных зон. Показано, что концентрация примеси основного компонента убывает во всей области фазового превращения, а концентрация примеси второго

примесного компонента имеет максимум в основной двухфазной области.

Теория дендритного роста в области фазового перехода обобщена на случай турбулизации жидкости в океане. В работе развита математическая модель процесса кристаллизации при наличии анизотропной и неоднородной области фазового превращения с учетом конвективного тепломассопереноса. Изложен механизм нарушения устойчивости процесса, заключающийся в конвективном переносе тепла и примеси по заполненным жидкостью каналам области фазового перехода. Проведен линейный анализ устойчивости с учетом течения среды в жидкой фазе системы, диффузии примеси в двухфазной зоне и зависимости коэффициентов переноса от фазового состава среды. Найден параметр эволюции возмущений для изотропной, однородной и анизотропной, неоднородной сред; получены кривые нейтральной устойчивости процесса. Показано, что учет диффузии примеси и увеличение неоднородности зоны фазового перехода расширяют область неустойчивости, а уменьшение анизотропии приводит к ее сужению. Получен новый критерий конвективной (морфологической) неустойчивости процесса кристаллизации с двухфазной зоной, который существенно увеличивает область неустойчивости при возрастании скорости конвективного течения расплава.

Разработана теория кристаллизации льда в трещинах от холодной границы с атмосферой, в которой учтены процессы роста второго слоя льда (ложного дна) снизу от океана к атмосфере вследствие проникновения талой воды в подледовое пространство в весенне-летний период времени. Показано что процессы кристаллизации сверху и снизу являются независимыми друг от друга вследствие того, что две зоны фазового перехода разделены между собой слоем пресной воды нулевой температуры. Определены распределения температуры, солёности морской воды, доли твердой фазы в обоих двухфазных регионах. Найдены законы нестационарной миграции границ фазовых переходов и скорости их движения.

В 2011 году выполнены следующие публикации по проекту:

1. Александров Д.В., Асеев Д.Л., Малыгин А.П. К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной // Расплавы, 2011, N 1, С. 16-30.
2. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Convective instability of solidification with a phase transition zone // JETP, 2011, Vol. 112, N 4, P. 596-601.
3. Иванов А.А., Малыгин А.П. Нелинейные эффекты при направленной кристаллизации трехкомпонентных расплавов с образованием двухфазных зон // Расплавы

(принята в печать).

4. Александров Д.В., Нетребва А.В., Малыгин А.П. К теории направленной кристаллизации с зоной фазового перехода при наличии конвекции и кинетики в расплаве // Тезисы докладов, “XVII Зимняя школа по механике сплошных сред”, Пермь, 28 февраля – 3 марта 2011, Р. 22.

5. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Galenko P.K. Effect of a Forced Flow on 3D Dendritic Growth in Binary Systems // Proc. 8th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, 11 – 13 July 2011 Pointe Aux Piments, Mauritius, P. 299-304.

Результаты выполнения НИР будут использованы:

1. Для получения новых выводов и дальнейшего развития знаний о динамике фазовых переходов при замерзании льда.
2. Для обновления лекционных курсов, читаемых студентам, таких как «Аналитические методы механики сплошных сред», «Тепломассоперенос», «Физика», написания пособий и учебно-научных монографий.
3. Для повышения квалификации молодых кадров в области геофизики, защиты кандидатских диссертаций членами группы, выполнения квалификационных работ членами группы - студентами.

Обобщение и оценка результатов исследований в сравнении с современным научно-техническим уровнем

Проведенные в рамках настоящего проекта исследования находятся на мировом уровне развития данного научного направления. Это, в частности, подтверждается тем, что результаты исследований опубликованы в престижных реферируемых тематических журналах, докладывались на отечественных и международных конференциях и вошли в кандидатские диссертации членов коллектива.

Обобщением проведенных исследований является решение поставленных в проекте задач, которое сводится к следующим обобщающим проект результатам:

На основании анализа литературных источников и проведения прогнозных

исследований были выбраны оптимальные методы решения рассматриваемых проблем (с учетом дополнительных работ, учитывающих развитие ложного (второго) дна).

Были разработаны математическая модель и метод ее решения для процессов замерзания воды в трещинах океанических льдов при учете турбулентных течений жидкости в океане и протяженной области фазового перехода (области совместного существования твердой и жидкой фаз) – двухфазной зоны. Математическая модель была разработана на основе работ коллектива авторов по данной проблеме (Д.В. Александров, А.П. Малыгин // Доклады АН, 2006, Т. 411, N 3, С. 390-394; Д.В. Александров, И.Г. Низовцева, Доклады АН // 2008, Т. 419, N 2, С. 262-265; D.V. Alexandrov, A.P. Malygin, I.V. Alexandrova // *Annals of Glaciology*, 2006, V. 44, P. 118-122), где была разработана модель и метод ее решения для изотермического океана и идеальных условий процесса – без учета течений жидкости и ее турбулизации вблизи растущей границы зоны льда и океана.

На основе методов решения, развитых в этих работах был разработан метод решения задачи при учете турбулентных течений жидкости в океане и его неизотермичности. Были определены распределения температуры и солёности, доли твердой фазы в области фазового перехода, исследована динамика положений границ фазового перехода лед – двухфазная зона и двухфазная зона – океан. Эти характеристики процесса позволили рассчитать поправки к тепловому потоку, исходящему с поверхности льда в атмосферу, которые вызваны замерзанием воды в трещинах льда.

Данные исследования были проведены с учетом дополнительных работ, учитывающих развитие ложного (второго) дна).

Были разработаны математическая модель и методы ее решения для исследования влияния волновых течений жидкости на процессы роста океанических льдов (на межфазную границу лед – морская вода) при учете пористости льда, протяженной области фазового превращения, неоднородного распределения давления. Был произведен анализ морфологической устойчивости, который позволил определить критические значения частоты колебаний и волнового числа (в зависимости от параметров системы) при которых происходит наступление режима неустойчивости (при таком режиме роста льда происходит значительное изменение его структуры и проницаемости). Данные исследования базировались на работах коллектива авторов в данном направлении (Д.В. Александров, А.П. Малыгин // Доклады АН, 2006, Т. 411, N 3, С. 390-394; D.V. Alexandrov // *J. Crystal Growth*, 2001, V. 222, P. 816-821; D.V. Alexandrov, D.L. Aseev // *J. Fluid Mech.*, 2005, V. 527, P. 57-66; D.V. Alexandrov, I.G. Nizovtseva // *Int. J. Heat Mass Trans.*, 2008, V. 51, P. 5204-5208; Д.В. Александров // Доклады АН, 2008, Т. 422, N 3, С. 322-326). Такое исследование позволило

определить потоки тепла и массы на границе лед – океан с учетом рассматриваемых процессов (обычно в геофизических расчетах граница лед – океан считается гладкой).

Были разработаны математическая модель и методы ее решения для дендритного роста льда (роста отдельно взятых выступов) при учете турбулизации жидкости на его поверхности. Данное исследование позволило изучить динамику роста изолированных дендритных структур, растущих в переохлажденной морской воде, с учетом течений жидкости вблизи межфазной границы лед – океан. Были разработаны модели и методы их решения для кристаллизации воды в трещинах льдов с учетом процессов образования и роста ложного дна. Данные исследования базировались на предыдущих работах коллектива авторов в данном направлении (Д.В. Александров, А.О. Иванов // Доклады АН, 2002, Т. 385, N 3, С. 323-327; D.V. Alexandrov, A.P. Malygin // Int. J. Heat Mass Trans., 2006, V. 49, P. 763-769; Д.В. Александров // ЖЭТФ, 2009, Т. 135, вып. 5, С. 942-950; Д.В. Александров, А.П. Малыгин // Доклады АН, 2006, Т. 411, N 3, С. 390-394; Д.В. Александров, И.Г. Низовцева, Доклады АН // 2008, Т. 419, N 2, С. 262-265). Были определены температурное поле, поле солености, положение межфазной границы, исследована эволюция переохлаждения в жидкости, определены поправки к тепловому потоку, вызванные совместным замерзанием воды в трещинах льда (в направлении океана) и ростом ложного дна (в обратном направлении). Такое исследование позволило изучить динамику роста дендритных структур льда в метастабильной переохлажденной морской воде и определить влияние ложного дна на замерзание воды в трещинах льда.

Разработка рекомендаций по использованию результатов НИР при создании научно-образовательных курсов. Методическое обеспечение образовательного процесса

Обобщающие проект результаты, сформулированные выше, составили обновленную тематику лекционных и практических занятий по спецкурсам «Аналитические методы механики сплошных сред», «Тепломассоперенос» в приложении к задачам геофизики и по общему курсу «Физика» в разделе «Явления переноса». Внедрение полученных результатов в учебный процесс (чтение лекций и проведение практических занятий) осуществляется профессором кафедры математической физики Д.В. Александровым и доцентом кафедры математической физики А.П. Малыгиным. Кроме этого, члены научного коллектива руководят дипломными и курсовыми работами студентов, тематика которых базируется на результатах настоящего проекта. Полученные результаты вошли в учебное пособие «Гидродинамика вязкой жидкости» (в части новых разработок по течению жидкости в

каналах двухфазной зоны и в части постановки турбулентных граничных условий на межфазных поверхностях), являющееся методическим обеспечением образовательного процесса.

Разработка рекомендаций по возможности использования результатов проведенных НИР в реальных секторах экономики

Поскольку используемые при изучении кристаллизации льдов математические модели являются задачами Стефана с подвижными областями фазовых переходов, их применение выходит далеко за рамки изучаемых геофизических задач. Так, например, найденные в проекте решения описывают затвердевание металлов, которое ответственно за формирование их микроструктуры и свойств. Для использования результатов проекта в металлургии требуется лишь заменить физические параметры морской воды на параметры изучаемых сплавов. Поэтому все результаты проекта переносятся со сделанной оговоркой на моделирование динамики затвердевания сплавов в конкретных физико-химических условиях реализации процессов на практике. С этой точки зрения, полученные результаты определяют оптимальные параметры кристаллизующейся системы для получения заданной структуры примесного распределения в затвердевшем материале. Оптимизация процессов затвердевания металлов и представляет собой рекомендации использования разработанных моделей и построенных решений в реальных секторах экономики.

Список используемых источников

1. Kurz W., Fisher D.J. Fundamentals of Solidification, 3rd ed., Aedermannsdorf: Trans Tech, 1992.
2. Herlach D.M., Galenko P., Holland-Moritz D. Metastable Solids from Undercooled Melts, Amsterdam: Elsevier, 2007.
3. Asta M., Beckermann C., Karma A., Kurz W., Napolitano R., Plapp M., Purdy G., Rappaz M., Trivedi R. // Acta Materialia, 2009, **57**, P. 941.
4. Galenko P.K., Funke O., Wang J., Herlach D.M. // Mater. Sci. Eng., 2004, **488**, P. 375-377.
5. Funke O., Phanikumar G., Galenko P.K., Chernova L., Reutzel S., Kolbe M., Herlach D.M. // J. Crystal Growth, 2006, **297**, P. 211.
6. Иванцов Г.П. // Докл. Акад. Наук СССР, 1947, **58**(4), С. 567.
7. Иванцов Г.П. // Докл. Акад. Наук СССР, 1952, **83**(4), С. 573.
8. Иванцов Г. П. // в кн.: Рост Кристаллов, Том 3, под ред. А.В. Шубников и П.П. Шефталъ, М: Академия Наук, 1961, стр. 75.
9. Темкин Д.Е. // Докл. Акад. Наук СССР, 1960, **132**(6), С.1307.
10. Темкин Д.Е. // Кристаллография, 1962, **7**(3), С. 446.
11. Horvay G., Cahn J.W. // Acta Metallurgica, 1961, **9**(7), P. 695.
12. Mullins W.W., Sekerka R.F. // J. Applied Physics, 1964, **35**, P. 444.
13. Nash G.E., Glicksman M.E. // Acta Matellurgica, 1994, **22**, P. 1283.

- 14 Langer J.S., Müller-Krumbhaar H. // Acta Metall., 1978, **26**, P. 1681.
15. Willnecker R., Herlach D., Feuerbacher B. // Phys. Rev. Lett., 1989, **62**, P. 2707.
16. Kessler D.A., Koplik J., Levine H. // Adv. Phys., 1988, **37**, P. 255.
17. Brenner E., Melnikov V.I. // Adv. Phys., 1991, **40**, P. 53.
18. Dash S.K., Gill W.N. // Int. J. Heat Mass Transfer, 1984, **27**, P. 1345.
19. Ben-Amar M., Bouissou Ph., Pelce P. // J. Crystal Growth, 1988, **92**, P. 97.
20. Bouissou Ph., Pelce P. // Phys. Rev. A, 1989, **40**(11), P. 6673.
21. Ben Amar M., Pelce P. // Phys. Rev. A, 1989, **39**, P. 4263.
22. Galenko P.K., Herlach D.M. // In: Phase Transformations in Multicomponent Systems. Edited by Herlach D.M., Weinheim: Wiley-VCH (2008), P. 353-373.
23. Meirmanov A.M. The Stefan Problem, Berlin: Walter de Gruyter, 1992.
24. Gupta S.C. Classical Stefan Problem, Amsterdam: Elsevier, 2003.
25. Ламб Г. Гидродинамика, Москва-Ленинград: ОГИЗ, 1947.
26. Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В. Теоретическая гидромеханика, Ч 2, Москва-Ленинград: ОГИЗ, 1948.
27. Pelce P., Bensimon D. // Nuclear Physics B, 1987, **2**, P. 259.
28. Pelce P. Dynamics of curved fronts, Boston: Academic Press, 1988.
29. Фрёман Н., Фрёман П.У. ВКБ-приближение, М: Мир, 1967.

30. Zel'dovich Ya., Istratov, A.G. Kidin N.I., Librovich V.B. // Combustion Science and Technology, 1980, **24**, P. 1.
31. Caroli B., Caroli C., Roulet B., Langer J.S. // Phys. Rev. A, 1986, **33**, P. 442.
32. Alexandrov D.V., Galenko P.K., Herlach D.M. // J. Crystal Growth, 2010, **312**, P. 2122.
33. Александров Д.В., Галенко П.К., Малыгин А.П., Херлах Д.М. // Вестник Удм. ун-та, 2010, **1**, С. 1.
34. Galenko P., Reutzel S., Herlach D., Danilov D., Nestler B. // Acta Materialia, 2007, **55**, P. 6834.
35. Galenko P., Reutzel S., Herlach D., Fries S., Steinbach I., Apel M. // Acta Materialia, 2009, **57**, P. 6166.
36. Tong X., Beckermann C., Karma A. // Q. Li, Phys. Rev. E, 2001, **63**, P. 061601.
37. Jeong J.-H., Goldenfeld N., Danzig J.A. // Phys. Rev. E, 2001, **64**, P. 041602.
38. Emsellem V., Tabeling P. // J. Crystal Growth, 1995, **156**, P. 285.
39. Trivedi R., Kurz W. // Acta Metall., 1986, **34**, P. 1663.
40. Galenko P.K., Danilov D.A. // Phys. Rev. E, 2004, **69**, P. 051608.
41. Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов, М.: Мир, 1974, 544 с.
42. Флемингс М. Процессы затвердевания, М.: Мир, 1977, 423 с.
43. Оно А. Затвердевание металлов, М.: Metallurgia, 1980, 152 с.
44. Иванцов Г.П. Диффузионное переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава // ДАН СССР, 1951, **81**, № 2, С. 179–182.

45. Buyevich Yu.A., Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Macrokinetics of crystallization, New-York – Wallingford: Begell House, 2001, 183 p.
46. Alexandrov D.V., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. Emergence of a mushy region in processes of binary melt solidification // Int. J. Fluid Mech. Research, 1999, **26**(2), P. 248-264.
47. Alexandrova I.V., Alexandrov D.V., Aseev D.L., Bulitcheva S.V. Mushy layer formation during solidification of binary alloys from a cooled wall: the role of boundary conditions // Acta Physica Polonica A, 2009, **115**, P. 791-794.
48. Alexandrov D.V. Incipience of a mushy zone in binary melt solidification processes // Int. J. Fluid Mech. Research, 2000, **27**, N 2-4, P. 223-238.
49. Александров Д.В. К теории зарождения двухфазной зоны концентрационного переохлаждения // Доклады АН, 2003, **392**, С. 322-327.
50. Stefan J. Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere // Ann. Phys. Chem., 1891, **42**, P. 269–286.
51. Mullins W.W., Sekerka R.F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy // J. Appl. Phys., 1964, **35**, P. 444-451.
52. Sekerka R.F. A stability function for explicit evaluation of the Mullins-Sekerka interface stability criterion // J. Appl. Phys., 1965, **36**, P. 264-268.
53. Sekerka R.F. Morphological stability // J. Crystal Growth, 1968, **3-4**, P. 71-81.
54. Александров Д.В., Мансуров В.В., Галенко П.К., Морфологическая устойчивость плоской границы раздела фаз бинарного расплава в процессах высокоскоростной кристаллизации // Доклады АН, 1996, **351**, С. 37-39.
55. Wollkind D.J., Segel L.A., A nonlinear stability analysis of the freezing of a dilute binary alloy // Philos. Trans. Roy. Soc. A, 1970, **268**, P. 351-380.

56. Alexandrov D.V. A nonlinear instability analysis of crystallization processes with a two-phase zone // J. Metast. Nanocryst. Mater., 2004, **20-21**, P. 468-475.
57. Асеев Д.Л., Александров Д.В., Нелинейная динамика затвердевания бинарного расплава с неравновесной двухфазной зоной // Доклады АН, 2006, **408**, С. 609-613.
58. Aseev D.L., Alexandrov D.V., Directional solidification of binary melts with a non-equilibrium mushy layer // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2006, **49**, P. 4903–4909.
59. Александров Д.В., Асеев Д.Л., Малыгин А.П. К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной // Расплавы, 2011, **1**, С. 16-30.
60. Worster M.G. Solidification of an alloy from a cooled boundary // J. Fluid Mech., 1986, **167**, - P. 481-501.
61. Alexandrov D.V. The effect of concentrational supercooling on the morphological stability of self-similar solidification with a planar front // Doklady Physics, 2001, **46**, P. 453-458.
62. Alexandrov D.V. Absolute morphological stability of the self-similar solidification with a planar front // J. Metast. Nanocryst. Mater., 2004, **20-21**, P. 476-481.
63. Alexandrov D.V. Self-similar solidification: morphological stability of the regime // Int. J. Heat Mass Transfer, 2004, **47**, P. 1383-1389.
64. Александров Д.В., Асеев Д.Л. Влияние термодиффузии на морфологическую устойчивость процесса автомодельного затвердевания с плоским фронтом // Расплавы, 2005, **2**, С. 50-62.
65. Александров Д.В., Иванов А.А., Малыгин А.П. К теории нестационарного затвердевания при наличии двухфазной зоны // Расплавы, 2008, **5**, С. 69-76.
66. Александров Д.В., Иванов А.А., Малыгин А.П. Автомодельное затвердевание с

двухфазной зоной от охлаждаемой стенки // Вестн. Удмурт. Ун-та, 2008, **1**, С. 14-25.

67. Alexandrov D.V., Ivanov A.A., Malygin A.P. Self-similar solidification of binary alloys // *Acta Physica Polonica A*, 2009, **115**, P. 795-799.

68. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. Dynamic stability analysis of the solidification of binary melts in the presence of a mushy region: changeover of instability // *Journal of Crystal Growth*, 2000, **210**, P. 797–810.

69. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone // *Q. J. Mech. Appl. Math.*, 1983, **36**, P. 505–539.

70. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка, М.: Metallurgy, 1987, 224 с.

71. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy zone: exact analytical solution // *Int. J. Fluid Mech. Research*, 2000, **27**, N 2-4, P. 213-222.

72. Александров Д.В. К теории затвердевания с квазиравновесной двухфазной зоной // Доклады АН, 2000, **375**, С. 172-176.

73. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy region: analytical solution of nonlinear mode // *J. Crystal Growth*, 2001, **222**, P. 816-821.

74. Alexandrov D.V., Aseev D.L. One-dimensional solidification of an alloy with a mushy zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity // *J. Fluid Mechanics*, 2005, **527**, P. 57-66.

75. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Directional solidification with a two-phase zone: thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity // *Computational Materials Science*, 2006, **37**, P. 1-6.

76. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Unidirectional solidification with a mushy layer. The influence of weak convection // *Acta Materialia*, 2006, **54**, P. 2401-2406.

77. Александров Д.В., Малыгин А.П. Аналитическое описание кристаллизации морской воды в трещинах льдов и их влияние на теплообмен между океаном и атмосферой // Доклады АН, 2006, **411**, С. 390-394.

78. Alexandrov D.V., Aseev D.L., Nizovtseva I.G., Huang H.-N., Lee D. Nonlinear dynamics of directional solidification with a mushy layer. Analytic solutions of the problem // Int. J. Heat Mass Transfer, 2007, **50**, P. 3616-3623.

79. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Malygin A.P., Huang H.-N., Lee D. Unidirectional solidification of binary melts from a cooled boundary: analytical solutions of a nonlinear diffusion-limited problem // J. Phys.: Cond. Matt., 2008, **20**, P. 114105-01-06.

80. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Lee D., Huang H.-N. Solidification from a cooled boundary with a mushy layer under conditions of nonturbulent and turbulent heat and mass transfer in the ocean // Int. J. Fluid Mech. Research, 2010, **37**, N 1, P. 1-14.

81. Александров Д.В., Низовцева И.Г., Нелинейная динамика ложного дна при замерзании морской воды // Доклады АН, 2008, **419**, С. 262-265.

82. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G. To the theory of underwater ice evolution, or nonlinear dynamics of “false bottoms // Int. J. Heat Mass Transfer, 2008, **51**, P. 5204-5208.

83. Scheil E. Bemerkungen zur schichtkristallbildung // Zeichrift fur Metallkunde, 1942, **34**, P. 70–72.

84. Kerr R.C., Woods A.W., Worster M.G., Huppert H.E. Solidification of an alloy cooled from above. Part 1. Equilibrium growth // J. Fluid Mech., 1990, **216**, P. 323–342.

85. Aitta A., Huppert H.E., Worster M.G. Diffusion-controlled solidification of a ternary melt from a cooled boundary // J. Fluid Mech., 2001, **432**, P. 201–217.

86. Anderson D.M. A model for diffusion-controlled solidification of ternary alloys in mushy layers // J. Fluid Mech., 2003, **483**, P. 165–197.

87. Александров Д.В., Иванов А.А. Задача Стефана затвердевания трехкомпонентных систем при наличии движущихся областей фазового перехода // ЖЭТФ, 2009, **135**, С. 942–950.
88. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Analytical solution for a problem of directional solidification in a ternary system // Acta Physica Polonica A, 2009, **115**, P. 786–790.
89. Александров Д.В. Нелинейная динамика затвердевания трехкомпонентных систем // Доклады Академии Наук, 2008, **422**, С. 322–326.
90. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Nonlinear dynamics of directional solidification of ternary solutions with mushy layers // Heat Mass Transfer, 2009, **45**, P. 1467-1472.
91. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Solidification of a ternary melt from a cooled boundary, or nonlinear dynamics of mushy layers // Int. J. Heat Mass Transfer, 2009, **52**, P. 4807–4811.
92. Александров Д.В., Мансуров В.В. Динамическая неустойчивость квазистационарного процесса затвердевания бинарного расплава при наличии узкой квазиравновесной двухфазной зоны // Кристаллография, 1996, **41**, N 2, С. 376-378.
93. Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Dynamic stability of a solidification process of a binary melt in the presence of a broad quasiequilibrium mushy region // Scripta Materialia, 1996, **35**, N 7, P. 787-790.
94. Александров Д.В., Мансуров В.В. Динамическая устойчивость квазистационарного процесса затвердевания бинарного расплава при наличии широкой квазиравновесной двухфазной зоны // Кристаллография, 1997, **42**, N 3, С. 402-404.
95. Alexandrov D.V. Linear analysis of dynamic instability of solidification with a quasiequilibrium mushy zone // Int. J. Fluid Mech. Research, 2000, **27**, N 2-4 P. 239-247.
96. Bergman M.I., Fearn D.R., Bloxham J., Shannon M.C. // Metall. Trans. A., 1997., **28**. P. 859-866.

97. Wettlaufer J.S., Worster M.G., Huppert H.E. // *Geophys. Res. Lett.*, 1997, **24**, P. 1251-1254.
98. Wettlaufer J.S., Worster M.G., Huppert H.E. // *J. Fluid Mech.*, 1997, **344**, P. 291-316.
99. Feltham D.L., Worster M.G., Wettlaufer J.S. // *Geophys. Res. Lett.*, 2002, **107**, № C2, art. no. 3009.
100. Hellawell A., Sarazin J.R., Steube R.S. // *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A*, 1993, **345**, P. 507-544.
101. Tait S., Jaupart C. // *J. Geophys. Res.*, 1992, **97**, P. 6735-6756.
102. Bergman M.I., Fearn D.R. // *Geophys. Res. Lett.*, 1994, **21**, P. 477-480.
103. Feltham D.L., Worster M.G. // *J. Fluid Mech.*, 1999, **391**, P. 337-357.
104. Badgley F.I. Heat budget at the surface of the Arctic Ocean, in *Proceedings of the Symposium on the Arctic Heat Budget and Atmospheric Circulation*, edited by J.O. Fletcher, pp. 267-278, Rand Corp., Santa Monica, Calif., 1966.
105. Maykut G.A. // *J. Geophys. Res.*, 1978, **83**, P. 3646-3654.
106. Maykut G.A. // *J. Geophys. Res.*, 1982, **87**, P. 7971-7984.
107. Александров Д.В., Иванов А.О. // *Доклады АН*, 2002, **385**, N 3, С. 323-327.
108. Huppert H.E., Worster M.G. // *Nature*, 1985, **314**, P. 703-707.
109. Morison J., McPhee M., Muench R., et al.: The LeadEx Group // *Eos Trans. AGU*. 1993, **74**, P. 393-397.
110. Wettlaufer J.S., Worster M.G., Huppert H.E. // *J. Geophys. Res.*, 2000, **105**, P. 1123-

1134.

111. Untersteiner N. // J. Geophys. Res., 1968, **73**, P. 1251.
112. Hanson A.M. // J. Glaciol., 1965, **5**, P. 701.
113. Зубов Н.Н. Льды Арктики, М.: Изд. Главсевморпути, 1945.
114. Martin S., Kauffman P. // J. Fluid Mech., 1974, **64**, P. 507.
115. Notz D., McPhee M.G., Worster M.G., Maykut G.A., Schlünzen K.H., Eicken H. // J. Geophys. Res., 2003, **108**, P. 3223.
116. Eicken H., Krouse H.R., Kadko D., Perovich D.K. // J. Geophys. Res., 2002, **107**, P. 8046.
117. Nansen F. Farthest North, Westminster: Constable, 1897.
118. Perovich D.K., Grenfell T.C., Richter-Menge J.A., Light B., Tucker III W.B., Eicken H. // J. Geophys. Res., 2003, **108**, P. 8050.
119. Gradinger R. // Mar. Ecol. Prog. Ser., 1996, **131**, P. 301.
120. Eicken H. // Limnol. Oceanogr., 1994, **39**, P. 682.
121. McPhee M.G., in The Geophysics of Sea Ice, ed. by N. Untersteiner, New York: Plenum, **133**, 1986.
122. McPhee M.G., Maykut G.A., Morison J.H. // J. Geophys. Res., 1987, **92**, P. 7017.
123. Owen P.R., Thomson W.R. // J. Fluid Mech., 1963, **15**, P. 321.
124. Perovich D.K., Maykut G.A. // J. Geophys. Res., 1990, **95**, P. 18,233.

Приложение

Образование двухфазной зоны перед плоским фронтом замерзания

Хорошо известно, что при определенных условиях перед плоским фронтом затвердевания может возникать концентрационное переохлаждение, которое приводит к появлению метастабильной области перед фронтом. В этой переохлажденной области возможен рост кристаллов в форме дендритов, объемная кристаллизация на включениях примеси и т.д. Так как эта зона является переходной между уже сформировавшимся кристаллом и расплавом, она получила название двухфазной.

В случае образования двухфазной зоны картина кристаллизации меняется коренным образом. В частности, становится неприменимой классическая термодиффузионная модель Стефана. Для описания процесса кристаллизации можно использовать одну из математических моделей двухфазной зоны.

Рассмотрим процесс направленной кристаллизации в области длины L . Области $0 < \xi < \Sigma(\tau)$ и $\Sigma(\tau) < \xi < L$ заполнены кристаллом и жидким бинарным расплавом соответственно (здесь $\Sigma(\tau)$ - положение границы фронта кристаллизации на момент времени τ). Фронт начинает движение от охлаждаемой границы $\xi = 0$, точнее, из положения $\xi = \Sigma(0)$ и движется по направлению к противоположной стенке $\xi = L$. Процесс затвердевания в твердой фазе и расплаве описывается следующими уравнениями теплопроводности и диффузии (диффузией в твердой фазе традиционно пренебрегаем):

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} = a_s \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial \xi^2}, \quad 0 < \xi < \Sigma(\tau) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \theta_l}{\partial \tau} = a_l \frac{\partial^2 \theta_l}{\partial \xi^2}, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \xi^2}, \quad \Sigma(\tau) < \xi < L \quad (2,3)$$

Здесь θ_s и θ_l - температуры кристалла и расплава, a_s и a_l - соответствующие коэффициенты теплопроводности, σ и D - концентрация примеси и коэффициент диффузии в расплаве.

Рассмотрим два режима охлаждения левой границы области:

1. Отводимый тепловой поток линейно увеличивается со временем (вынужденное

(«активное») охлаждение)

$$\lambda_s \frac{\partial \theta_s}{\partial \xi} - \lambda_l g_l = \alpha_a \tau, \quad \xi = 0 \quad (4)$$

2. Теплообмен с окружающей средой через левую стенку осуществляется по закону Ньютона (естественное («пассивное») охлаждение)

$$\lambda_s \frac{\partial \theta_s}{\partial \xi} = \alpha_p (\theta_s - \theta_E), \quad \xi = 0, \quad (5)$$

где α_a - коэффициент охлаждения, α_p - коэффициент теплообмена, θ_E - температура окружающей среды, λ_s и λ_l - коэффициенты теплопроводности в твердой фазе и расплаве, g_l - градиент температуры в расплаве.

В некоторый момент времени $\tau = \tau_*$ перед плоским фронтом кристаллизации может возникнуть концентрационное переохлаждение, т.е. состояние, при котором градиент концентрации примеси превышает температурный градиент на фронте кристаллизации вследствие вытеснения примеси движущимся фронтом:

$$-m \frac{\partial \sigma}{\partial \xi} > \frac{\partial \theta_l}{\partial \xi}, \quad \xi = \Sigma(\tau),$$

где m - наклон линии ликвидуса.

Последнее приводит к образованию впереди фронта двухфазной зоны, в которой происходит фрактальный рост элементов твердой фазы. Процессы, происходящие в двухфазной зоне, описываются уже другими уравнениями, поэтому вышеприведенные модели для «активного» (4) и «пассивного» (5) режимов затвердевания, строго говоря, справедливы только на временах $\tau < \tau_*$. Время τ_* зарождения двухфазной зоны будем определять из условия:

$$-m \frac{\partial \sigma}{\partial \xi} = \frac{\partial \theta_l}{\partial \xi}, \quad \xi = \Sigma(\tau_*), \tau = \tau_* \quad (6)$$

Вышеописанная модель представляет собой задачу с неизвестными подвижными

границами. Для приведения этой задачи к стандартному виду (с неподвижными границами) было использовано преобразование координат отдельно для областей кристалла и расплава. Таким образом, исходную задачу удалось свести к системе параболических уравнений в частных производных с переменными коэффициентами, определенных на фиксированных областях. Аналогично были преобразованы начальные и граничные условия. Решение системы проводилось по неявной четырехточечной конечно-разностной схеме с точностью $O(h^2 + \tau)$. Здесь h, τ – шаги пространственной и временной сеток. Преимуществами данной схемы являются простота реализации и слабая зависимость сходимости от отношения h/τ при расчетах на небольших отрезках времени. Численное решение СДУ на i -м шаге ($\tau = \tau_i$) сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений порядка $N = 1/h$, причем матрица системы имеет трехдиагональный вид и обладает диагональным преобладанием, что дает возможность решить СЛУ методом прогонки за время $O(N)$. При расчетах, результаты которых приведены в статье, использовалась однородная пространственно-временная сетка.

На рис. 1 видно, что скорость затвердевания является линейной функцией времени до момента образования двухфазной зоны. Положение фронта кристаллизации, соответственно, меняется по параболическому закону. Большие значения коэффициента «активного» охлаждения α_a соответствуют более быстрому процессу кристаллизации, т.к. увеличивается отвод тепла через левую охлаждаемую границу. Это приводит к более раннему зарождению двухфазной зоны. Аналогичное влияние на время зарождения двухфазной зоны оказывает и увеличение градиента температуры в расплаве (фактически, теплового потока, подводимого к образцу через правую стенку): с ростом g_l (при фиксированном α_a) время зарождения увеличивается (см. рис. 2). Это объясняется тем обстоятельством, что при больших значениях градиента g_l растущему кристаллу необходимо вытеснить большее количество примеси, чтобы удовлетворить условию концентрационного переохлаждения (6) и, следовательно, пройти для этого большее расстояние и затратить большее время. Также из рис. 2 видно, что при уменьшении скорости охлаждения положение образующейся двухфазной зоны все более сдвигается к правой границе. Время кристаллизации при этом также увеличивается.

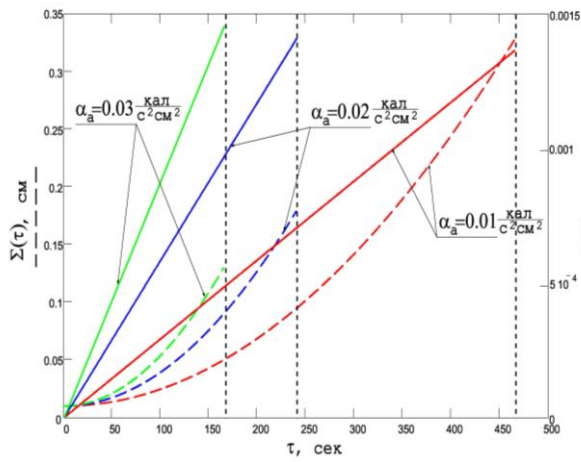


Рис.1: Зависимость координаты (Σ) и скорости движения ($d\Sigma/d\tau$) фронта кристаллизации от времени (τ) при различных значениях коэффициента "активного" охлаждения (α_a).

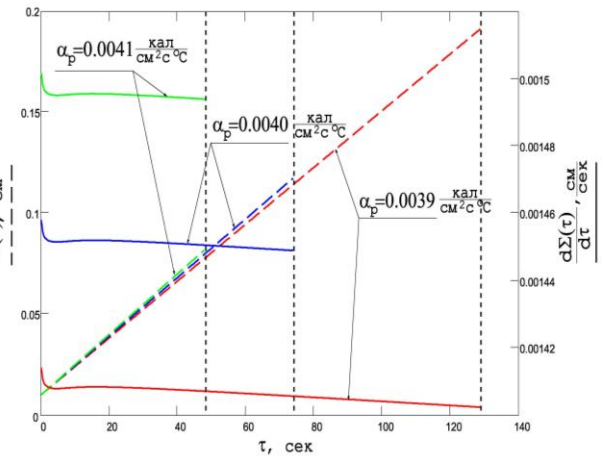


Рис.3: Зависимость координаты (Σ) и скорости движения ($d\Sigma/d\tau$) фронта кристаллизации от времени (τ) при различных значениях коэффициента "пассивного" охлаждения (α_p).

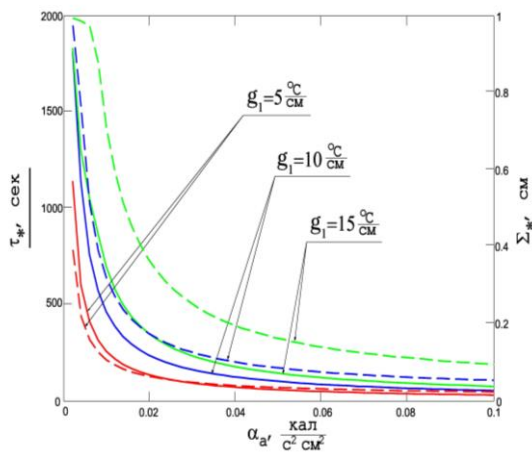


Рис.2: Зависимость времени (τ_*) и координаты (Σ_*) образования двухфазной зоны от коэффициента "активного" охлаждения (α_a) при различных значениях градиента температуры в расплаве (g_l).

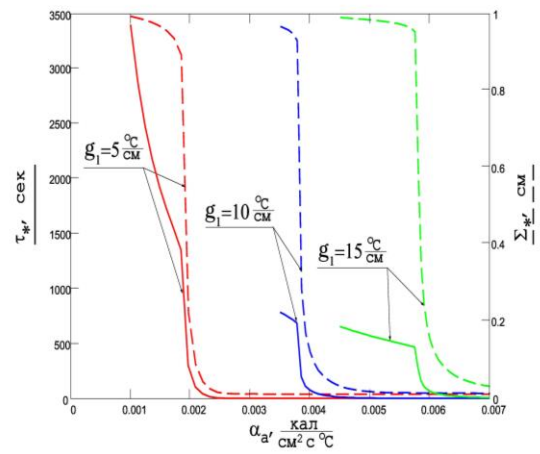


Рис.4: Зависимость времени (τ_*) и координаты (Σ_*) образования двухфазной зоны от коэффициента "пассивного" охлаждения (α_p) при различных значениях градиента температуры в расплаве (g_l).

На рис. 3 и 4 изображены результаты расчетов для случая «пассивного» охлаждения. Видно, что скорость кристаллизации медленно уменьшается с увеличением времени, поскольку область остывает при постоянной температуре окружающей среды. Рис. 4 иллюстрирует зависимости времени τ_* зарождения двухфазной зоны и положения фронта кристаллизации на момент времени τ_* от коэффициента теплообмена α_p . В общем, физическая ситуация здесь аналогична режиму «активного» охлаждения с поправкой на изменения характера исследуемых зависимостей.